



# **Estudio computacional de la combustión premezclada de un gas producto de la gasificación de biomasa en un motor de combustión interna (MCI).**

**David Sebastian Pérez Gordillo**

Universidad Nacional de Colombia  
Facultad de Ingeniería, Departamento de Ingeniería Mecánica y Mecatrónica  
Bogotá, Colombia  
2019



# **Estudio computacional de la combustión premezclada de un gas producto de la gasificación de biomasa en un motor de combustión interna (MCI).**

**David Sebastian Pérez Gordillo**

Tesis de grado presentada como requisito parcial para optar al título de:

**Magister en Ingeniería-Ingeniería Mecánica**

Director (a):

I.M, MSc, PhD Juan Miguel Mantilla González

Línea de Investigación:

Dinámica de fluidos computacional, motores combustión interna, combustibles  
alternativos y optimización computacional

Grupo de Investigación:

Grupo de Modelado y Métodos Numéricos en Ingeniería (GNUM)

Universidad Nacional de Colombia

Facultad de Ingeniería, Departamento de Ingeniería Mecánica y Mecatrónica

Bogotá, Colombia

2019



***A Dios, a mis padres, a mis hermanos y a mi novia. Por su guía espiritual, por su cariño, por su constante e incondicional apoyo y por el invaluable acompañamiento brindado durante toda mi vida personal y profesional.***



## **Agradecimientos**

Este proyecto contó con el apoyo y la colaboración de varias personas e instituciones, por esta razón el autor desea expresar sus agradecimientos a quienes de una forma u otra contribuyeron al desarrollo de este trabajo. Inicialmente quiero expresar mi gratitud al profesor Juan Miguel Mantilla González, director de esta investigación, quien con su experiencia fue una excelente guía académica y motivacional durante todas las etapas de trabajo, sin sus conocimientos hubiera sido imposible realizar adecuadamente el proyecto. También quiero agradecerles a los ingenieros Carlos Alberto Barrera Soto y Carlos Felipe Forigua quienes colaboraron constantemente con el manejo de KIVA-UN, aportando diferentes soluciones para los problemas que en algunas ocasiones presentaba el software. Por otro lado estoy muy agradecido con los ingenieros Jorge Arroyo de la Universidad de Zaragoza y George Kosmadakis de la Universidad de Atenas, quienes muy amablemente proporcionaron de forma oportuna los datos necesarios para el desarrollo del modelo del motor Lombardini LGW-523-MPI y para la posterior validación del mismo. Finalmente quiero agradecerle a la Universidad Nacional de Colombia por mi formación profesional, de forma más específica a la Dirección Académica por la beca otorgada, la cual me permitió financiar mis estudios y manutención durante gran parte del tiempo invertido a esta investigación.





## Resumen

Esta investigación tiene por objetivo principal la optimización computacional de un motor de combustión interna encendido por chispa, alimentado con un gas de síntesis producto de la gasificación de biomasa. Para lograr esto, KIVA se utiliza como plataforma de simulación y se desarrolla un modelo tridimensional del dominio, considerando los procesos de admisión y escape en las pruebas realizadas computacionalmente. En este proceso se somete el modelo a un estudio de convergencia de malla para elegir la discretización espacial adecuada. Buscando evaluar la veracidad de los resultados obtenidos en las simulaciones, se hace una comparación respecto a datos experimentales reportados de la literatura.

Para la optimización computacional, se utiliza una subrutina que acopla KIVA al algoritmo genético NSGA II. El proceso de optimización se realiza a 2500 [RPM] y 4500 [RPM], buscando maximizar la eficiencia térmica indicada y minimizar las emisiones de NO, variando la relación de equivalencia en la cámara de combustión. De los resultados se deduce que el rendimiento del motor presenta sus valores óptimos para mezclas cercanas a la estequiométrica. En esta misma zona las emisiones de CO son mínimas, pero también se presentan elevadas concentraciones de CO<sub>2</sub> y las mayores emisiones de NO. Se observa que es admisible obtener concentraciones de NO, eficiencias térmicas indicadas y emisiones de CO similares o mejores a las conseguidas en la operación convencional del motor, es decir cuando este es alimentando con gasolina.

**Palabras clave:** Motor de combustión interna, simulación 3D, optimización computacional, gas de síntesis, ignición por chispa, gas derivado de biomasa, simulación de ciclo abierto.

## Abstract

The main objective of this research is the computational optimization of a spark-ignited internal combustion engine, powered by a synthesis gas produced by biomass gasification. To achieve this, KIVA is used as simulation platform and a three-dimensional domain model is developed, considering the admission and escape processes in the computationally performed tests. In this process, the model is subjected to a mesh convergence study to choose the appropriate spatial discretization. In order to evaluate the veracity of the results obtained in the simulations, a comparison is made with respect to experimental data reported from the literature.

In computational optimization, a subroutine is used that couples KIVA to the genetic algorithm NSGA II. The optimization process is performed at 2500 [RPM] and 4500 [RPM], seeking to maximize the indicated thermal efficiency and minimize NO emissions, varying the equivalence ratio in the combustion chamber. From the results, it is deduced that the performance of the engine presents its optimal values for mixtures close to the stoichiometry. In this same zone, CO emissions are minimal, but high CO<sub>2</sub> concentrations and higher NO emissions are also present. It is observed that it is permissible to obtain NO concentrations, indicated thermal efficiencies and CO emissions similar to or better than those achieved in the conventional operation of the engine, ie when it is fueling with gasoline.

**Keywords:** Internal combustion engine, 3D simulation, computational optimization, synthesis gas, spark ignition, gas derived from biomass, simulation of open cycle.

# Contenido

<b>Resumen .....</b>	<b>IX</b>
<b>Abstract.....</b>	<b>X</b>
<b>Lista de figuras.....</b>	<b>XIII</b>
<b>Lista de tablas .....</b>	<b>XV</b>
<b>Lista de abreviaturas.....</b>	<b>XVII</b>
<b>Introducción .....</b>	<b>1</b>
<b>1. Planteamiento del problema.....</b>	<b>5</b>
1.1 Hipótesis .....	6
1.2 Objetivos .....	10
<b>2. Marco teórico.....</b>	<b>11</b>
2.1 Modelos CFD utilizados en KIVA-UN y mecanismos de reacción.....	11
2.2 NSGA II.....	12
<b>3. Modelo desarrollado y convergencia de malla.....</b>	<b>15</b>
3.1 Mallado del MCI-SI.....	16
3.2 Modelo desarrollado.....	18
3.3 Convergencia de malla.....	21
3.3.1 Verificación de las relaciones de compresión y expansión.....	22
3.3.2 Resultados y análisis .....	25
<b>4. Validación del modelo desarrollado .....</b>	<b>31</b>
4.1 Verificación de la mezcla admitida .....	31
4.2 Mecanismos de reacción y chispa.....	35
4.3 Resultados y análisis.....	39
<b>5. Optimización computacional.....</b>	<b>49</b>
5.1 Acople entre KIVA y el algoritmo NSGA II .....	50

5.2	Resultados y análisis .....	51
5.2.1	Análisis paramétrico del modelo desarrollado .....	54
5.2.2	Análisis de los individuos de la última generación .....	63
<b>6.</b>	<b>Conclusiones y recomendaciones .....</b>	<b>69</b>
6.1	Conclusiones .....	69
6.2	Recomendaciones .....	73
<b>Referencias bibliográficas.....</b>		<b>75</b>
<b>Anexo A. Modelos CFD utilizados en KIVA-UN y mecanismos de reacción.....</b>		<b>81</b>
A.1	Ecuaciones gobernantes.....	81
A.2	Esquema numérico y computacional.....	87
A.2.1	Acople entre KIVA-4 y Cantera .....	89
A.3	Mecanismos de reacción.....	90
<b>Anexo B. Optimización computacional de MCI.....</b>		<b>93</b>
B.1	Algoritmos genéticos .....	95
B.2	Algoritmos genéticos multiobjetivo .....	96
<b>Anexo C. Archivos de entrada para los casos de validación y optimización .....</b>		<b>99</b>
C.1	Caso C1 y optimización a 2500 [RPM].....	99
C.2	Caso C2.....	103
C.3	Caso C3 y optimización a 4500 [RPM].....	107
C.4	Caso C4.....	110
<b>Anexo D. Muestra de cálculos .....</b>		<b>115</b>
D.1	Potencia indicada.....	115
D.2	Presión media efectiva indicada.....	116
D.3	Consumo específico de combustible indicado.....	116
D.4	Cálculos con base en las curvas de fábrica del motor.....	116
D.5	Fracción de masa quemada.....	117
D.6	Calor liberado .....	117
<b>Anexo E. Resultados de los individuos de la última generación .....</b>		<b>119</b>
E.1	Optimización a 2500 [RPM].....	119
E.2	Optimización a 4500 [RPM].....	123
<b>Anexo F. Contornos de temperatura .....</b>		<b>127</b>

## Lista de figuras

<b>Figura 1.</b> Ilustración de los conceptos de dominancia y frente de Pareto. Fuente: [26].	14
<b>Figura 2.</b> Análisis de imagen, motor Lombardini LGW-523-MPI.	17
<b>Figura 3.</b> Regiones existentes en el dominio desarrollado para el motor Lombardini LGW-523-MPI. Azul oscuro: región 1, verde: región 2, amarillo: región 3, rojo: región 4.	19
<b>Figura 4.</b> Evolución temporal del promedio en la cámara de combustión de la presión, la TKE y la SCL. Para diferentes mallas simuladas en frío.	26
<b>Figura 5.</b> Variación relativa promedio en los valores de presión, TKE y SCL, respecto al número de celdas en todo el dominio computacional.	28
<b>Figura 6.</b> Malla seleccionada para simular el motor Lombardini LGW-523-MPI. Malla 5: 104132 celdas.	29
<b>Figura 7.</b> Resultados experimentales y computacionales para cada uno de los casos de validación. Fuente de resultados experimentales: [8, 83].	42
<b>Figura 8.</b> Emisión de NO [g] respecto a la eficiencia térmica indicada [%].	53
<b>Figura 9.</b> Consumo de combustible [g] respecto a la presión inicial en el depósito [kPa].	54
<b>Figura 10.</b> Relación de equivalencia [-] respecto a la presión inicial en el depósito [kPa].	55
<b>Figura 11.</b> Potencia indicada [kW] respecto a la relación de equivalencia [-].	56
<b>Figura 12.</b> IMEP [kPa] respecto a la relación de equivalencia [-].	56
<b>Figura 13.</b> ISFC [g/kW-h] respecto a la relación de equivalencia [-].	57
<b>Figura 14.</b> Eficiencia térmica indicada [%] respecto a la relación de equivalencia [-].	58
<b>Figura 15.</b> Emisión de NO [g] respecto a la relación de equivalencia [-].	59
<b>Figura 16.</b> Emisión de CO <sub>2</sub> [g] respecto a la relación de equivalencia [-].	60

<b>Figura 17.</b> Emisión de CO [g] respecto a la relación de equivalencia [-].	61
<b>Figura 18.</b> Emisión de CO [g] respecto a la eficiencia térmica indicada [%].	62
<b>Figura 19.</b> Presión máxima [kPa] respecto a la relación de equivalencia [-].	64
<b>Figura 20.</b> Angulo del cigüeñal de máxima presión [CAD] respecto a la relación de equivalencia [-].	65
<b>Figura 21.</b> HR acumulado por ciclo [kJ] respecto a la relación de equivalencia [-].	66
<b>Figura 22.</b> Duración de la combustión [CAD] respecto a la relación de equivalencia [-].	66
<b>Figura 23.</b> Evolución temporal de la presión para los individuos finales de la optimización a 2500 [RPM].	120
<b>Figura 24.</b> Evolución temporal del HR acumulado para los individuos finales de la optimización a 2500 [RPM].	121
<b>Figura 25.</b> Evolución temporal de la fracción de masa quemada para los individuos finales de la optimización a 2500 [RPM].	121
<b>Figura 26.</b> Curva de la presión respecto al volumen para los individuos finales de la optimización a 2500 [RPM].	122
<b>Figura 27.</b> Curva logarítmica de la presión respecto al volumen para los individuos finales de la optimización a 2500 [RPM].	122
<b>Figura 28.</b> Evolución temporal de la presión para los individuos finales de la optimización a 4500 [RPM].	124
<b>Figura 29.</b> Evolución temporal del HR acumulado para los individuos finales de la optimización a 4500 [RPM].	124
<b>Figura 30.</b> Evolución temporal de la fracción de masa quemada para los individuos finales de la optimización a 4500 [RPM].	125
<b>Figura 31.</b> Curva de la presión respecto al volumen para los individuos finales de la optimización a 4500 [RPM].	125
<b>Figura 32.</b> Curva logarítmica de la presión respecto al volumen para los individuos finales de la optimización a 4500 [RPM].	126
<b>Figura 33.</b> Contornos de temperatura para el caso de validación C3.	127

## Lista de tablas

<b>Tabla 1.</b> Datos del motor Lombardini LGW-523-MPI. Fuente: [8, 82, 83, 84].	16
<b>Tabla 2.</b> Mallas evaluadas en el proceso de convergencia.	21
<b>Tabla 3.</b> Caso de simulación en el estudio de convergencia de malla y composición del gas de síntesis 2 estudiado en [8]. Fuente: [8, 83].	22
<b>Tabla 4.</b> Verificación para cada una de las mallas evaluadas, de las relaciones $RC_{vol}$ , $RC_{real}$ , $RE_{real}$ .	25
<b>Tabla 5.</b> Variaciones obtenidas en la comprobación del estudio de convergencia a 4500 [RPM].	30
<b>Tabla 6.</b> Casos de validación. Fuente: [8, 83].	31
<b>Tabla 7.</b> Verificación de la mezcla admitida para cada caso de validación.	35
<b>Tabla 8.</b> Constantes para el cálculo de la constante de equilibrio. Fuente: [46, 49].	37
<b>Tabla 9.</b> Constantes de Arrhenius para el mecanismo cinético. Unidades: [mol], [seg], [cm <sup>3</sup> ] y [K]. Fuente: [35, 38, 73, 74].	39
<b>Tabla 10.</b> Comparación para cada caso de validación de la magnitud y ubicación temporal de la $P_{max}$ . Fuente de resultados experimentales: [8, 83].	40
<b>Tabla 11.</b> Valores experimentales y computacionales de los parámetros indicados del motor y sus emisiones contaminantes, para cada uno de los casos de validación. Fuente de resultados experimentales: [8, 83, 91, 92].	44
<b>Tabla 12.</b> Errores relativos en cada caso de validación, de los resultados computacionales respecto a los experimentales.	46
<b>Tabla 13.</b> Comparaciones experimentales y computacionales respecto a los casos de referencia C2 y C4.	47
<b>Tabla 14.</b> Condiciones y restricciones para los casos de optimización.	50

<b>Tabla 15.</b> Convenciones utilizadas para las gráficas reportadas en la optimización. ....	52
<b>Tabla 16.</b> Resultados obtenidos para los primeros 7 individuos de la última generación en la optimización a 2500 [RPM].....	119
<b>Tabla 17.</b> Resultados obtenidos para los últimos 7 individuos de la última generación en la optimización a 2500 [RPM]. ....	120
<b>Tabla 18.</b> Resultados obtenidos para los primeros 7 individuos de la última generación en la optimización a 4500 [RPM].....	123
<b>Tabla 19.</b> Resultados obtenidos para los últimos 7 individuos de la última generación en la optimización a 4500 [RPM]. ....	123



## Lista de abreviaturas

ABDC	Grados después del punto muerto inferior
AF	Relación aire-combustible másica real
$AF_{stq}$	Relación aire-combustible másica estequiométrica
ARMOGA	Algoritmo genético multiobjetivo de rango adaptativo
ATDC	Grados después del punto muerto superior
BBDC	Grados antes del punto muerto inferior
BTDC	Grados antes del punto muerto superior
CAD	Ángulo del cigüeñal en grados
CFD	Dinámica de fluidos computacional
CH <sub>4</sub>	Metano
CO	Monóxido de carbono
CO <sub>2</sub>	Dióxido de carbono
EmC	Emisiones contaminantes
GA	Algoritmos genéticos
H <sub>2</sub>	Hidrogeno
HR	Calor liberado
IMEP	Presión media efectiva indicada
ISFC	Consumo específico de combustible indicado
LHV	Poder calorífico inferior
MCI	Motores de combustión interna
MCI-SI	Motores de combustión interna encendidos por chispa
$m_{fuel}$	Masa de combustible admitida por ciclo y por cilindro
$\dot{m}_{fuel}$	Flujo másico de combustible consumido por el motor
$m_{mez}$	Masa de mezcla admitida por ciclo y por cilindro
MOGA	Algoritmos genéticos multiobjetivo
NO	Monóxido de nitrógeno
NOx	Óxidos de nitrógeno
NSGA	Algoritmo genético de clasificación no dominada
$P_{adm}$	Presión de admisión
$P_{dep}$	Presión inicial en el depósito de combustible
PGS	Escalado del gradiente de presión

---

PI	Potencia indicada
$P_{\max}$	Presión máxima en la cámara de combustión
PMI	Punto muerto inferior
PMS	Punto muerto superior
RANS	Ecuaciones de Navier-Stokes promediadas
$RC_{\text{real}}$	Relación de compresión real
$RC_{\text{vol}}$	Relación de compresión volumétrica
$RE_{\text{real}}$	Relación de expansión real
RPM	Velocidad de giro del motor en revoluciones por minuto
RVC	Reactor a volumen constante
$S_{\text{CAD}}$	Angulo del cigüeñal en el que inicia la chispa
SCL	Longitud de escala turbulenta
SFC	Consumo específico de combustible
SIMPLE	Algoritmo para resolver las ecuaciones de Navier-Stokes
$T_{\text{adm}}$	Temperatura de admisión
TKE	Energía cinética turbulenta
Vd	Volumen de desplazamiento por cilindro
$V_{\text{AVE}}$	Volumen de la cámara de combustión en el momento en que se abre la válvula de escape
$V_{\text{CVA}}$	Volumen de la cámara de combustión en el momento en que se cierra la válvula de admisión
$V_{\text{PMI}}$	Volumen de la cámara de combustión en el punto muerto inferior
$V_{\text{PMS}}$	Volumen de la cámara de combustión en el punto muerto superior
WI	Trabajo indicado por cilindro
Xb	Fracción de masa quemada

# Introducción

La trascendencia que tiene la investigación en la combustión de biomasa o derivados se evidencia cuando se enfrenta el calentamiento global y las crisis energéticas asociadas a la escasez de combustibles fósiles [1, 2]. De forma proporcional al aumento en la demanda mundial de energía y la preocupación por el medio ambiente, los gases derivados de biomasa son considerados una alternativa de solución importante en el futuro, en aplicaciones como la generación combinada de energía y calor (CHP) por medio de motores de combustión interna (MCI) [3, 4, 5]. Los gases derivados de biomasa pueden clasificarse en biogás y gas de síntesis. El gas de síntesis está compuesto principalmente por hidrógeno, metano, dióxido de carbono y monóxido de carbono. Por otro lado el gas producto o biogás se obtiene a partir de la gasificación de biomasa, y el gas de síntesis a partir de un proceso de “purificación” del biogás, que tiene como principal objetivo separar los alquitranes [6].

El acople entre gasificadores de biomasa y MCI constituye una opción viable para la generación de calor y energía a pequeña escala (hasta 500 [kW]) [3]. Los motores de encendido por chispa alimentados con combustibles gaseosos se utilizan normalmente para la generación combinada de calor y energía eléctrica, sin embargo no se descarta su uso en otros sectores industriales, como por ejemplo el transporte [5]. El potencial que tienen los gases de síntesis para su utilización futura requiere una predicción fiable de su comportamiento de combustión en diversos sistemas y aplicaciones [7]. Con este fin, el modelado computacional es una estrategia útil y prometedora, ya que reduce los costos en relación con los estudios experimentales [7].

Se han realizado algunos estudios, tanto experimentales como computacionales, concernientes a motores alimentados con gases derivados de biomasa. Este gas puede utilizarse como único combustible para abastecer el motor en cuestión. No obstante los estudios encontrados coinciden en que el motor sufre reducciones en su rendimiento, en comparación a su alimentación con combustibles convencionales. Lo anterior pone en tela

de juicio la viabilidad de su implementación real [1, 4, 5, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14]. Sin embargo es necesario resaltar que esto se debe principalmente a que los motores de estudio fueron diseñados inicialmente para su operación con combustibles convencionales [12, 13, 14]. De esta forma la optimización es una herramienta promisorio, modificando tanto el diseño, como la configuración inicial del motor original, para adaptarse a su alimentación con derivados de biomasa. El uso de gases de síntesis como aditivo de combustibles convencionales también ha sido caso de estudio en MCI [15, 16]. Los resultados del uso de gas de síntesis como complemento son alentadores, por ejemplo al mezclarse con  $\text{CH}_4$  se evidencia una mejora en el fenómeno de combustión, ya que el contenido de gas de síntesis aumenta la eficiencia del motor respecto a su alimentación con  $\text{CH}_4$  puro [15]. Otro estudio concluye que al adicionar gas de síntesis al combustible diésel, la presión dentro del cilindro no cambia demasiado, incluso cuando se reduce sustancialmente la cantidad de combustible diésel [16].

Los modelos y algoritmos computacionales, para el diseño y la optimización de MCI, han mejorado considerablemente la eficiencia y las emisiones contaminantes (EmC) de estos dispositivos [17]. Las simulaciones de motores proporcionan información relevante y detallada, concerniente al ciclo termodinámico y a las EmC del aparato. El objetivo del modelado es guiar el diseño, montaje, condiciones y disposición del motor, a mejorar el rendimiento y reducir las EmC del mismo [17]. Por su parte, la función de la optimización computacional es encontrar combinaciones óptimas en las variables de diseño o parámetros de entrada, con las cuales se puedan lograr valores mínimos o máximos de las funciones objetivo de interés [17].

Existen varios estudios relacionados con la optimización computacional de motores, la mayoría de ellos alimentados con combustibles convencionales [17, 18, 19, 20, 21, 22, 23, 24, 25]. Los objetivos de la optimización son principalmente la reducción de EmC y el aumento del rendimiento del motor. La mayoría de los estudios se centran en la optimización de la geometría del dominio, principalmente de la cámara de combustión. Solo algunos optimizan parámetros operativos del motor [19, 21, 22, 25]. En todos los casos, los resultados obtenidos muestran mejoras considerables en el consumo específico de combustible (SFC), la eficiencia, la potencia o diferentes EmC, respecto a la configuración o diseño original del motor. Esto resalta la importancia de la optimización computacional, convirtiéndola en una herramienta indispensable en el diseño, implementación y desarrollo de MCI [17].

Por su parte, la optimización de motores alimentados con gases derivados de biomasa, es un campo de investigación, que aunque prometedor, ha sido poco explorado, ya que en la mayoría de casos se deja para estudios futuros. Como único antecedente encontrado, se tiene un estudio realizado a un motor alimentado con una mezcla de gas de síntesis y diésel [26]. Se optimizaron las condiciones de suministro de combustible, la composición del gas de síntesis y las condiciones de admisión, con los objetivos de minimizar las emisiones de  $\text{NO}_x$  y el consumo específico de combustible [26]. Para esto se implementó el algoritmo NSGA II, utilizando KIVA-3V como plataforma para la simulación del motor en ciclo cerrado bajo las diferentes condiciones de operación. Los resultados muestran que el control de los tiempos de inyección y la implementación de premezcla, logran mantener en niveles bajos las emisiones de  $\text{NO}_x$  [26]. El aumento del contenido de  $\text{H}_2$  aumenta la eficiencia del motor, sin embargo cuando la proporción de  $\text{H}_2$  es mayor del 80%, la mejora en el consumo específico de combustible se vuelve menos significativa [26]. Es importante anotar que los métodos predilectos para la optimización computacional de motores son los algoritmos genéticos (GA) [17]. Esto se evidencia porque todos los estudios encontrados usan estos métodos. También se observa una preferencia por KIVA como software para la simulación de motores, debido a los modelos que tiene implementados y la facilidad para acoplarse a los GA.

En la revisión bibliográfica realizada no se encontraron estudios de optimización de motores en ciclo abierto. Sin embargo, la implementación del ciclo completo del motor permite involucrar la influencia que tienen los procesos de admisión y escape en los resultados de la simulación. De forma más específica, la apertura del dominio computacional junto con la geometría y el movimiento de las válvulas tienen un efecto importante en las condiciones de flujo presentes en la cámara de combustión [17]. Dichas condiciones alteran directamente el proceso de mezcla y consecuentemente el fenómeno de combustión, lo que se traduce en un impacto en las emisiones contaminantes y el rendimiento del motor [17].

La gran cantidad de campos industriales donde es requerida la quema de algún combustible, y el decremento en las reservas de combustibles fósiles, hace necesario el desarrollo alrededor de los combustibles alternativos [1 2]. Como se dijo anteriormente los MCI alimentados con derivados de biomasa han venido tomando fuerza para combatir la crisis energética y la contaminación. Sin embargo existen varias incertidumbres y problemas asociados a su implementación, las EmC y el rendimiento del motor son algunos

de ellos [27]. La optimización computacional es una herramienta con gran potencial para dar solución a los diferentes inconvenientes que presenta la combustión de gases de síntesis [26]. Por otro lado, la simulación del ciclo abierto permite tener en cuenta aspectos adicionales de la operación real del motor, principalmente asociados a los procesos de admisión y escape. Basándose en estas premisas, este trabajo busca dar solución parcial y específica a algunos de los problemas asociados a la combustión de derivados de biomasa en motores. Teniendo por objetivo la optimización computacional en ciclo abierto de un motor encendido por chispa, alimentado con un gas de síntesis. Para esto se hace uso de un algoritmo genético multiobjetivo (MOGA), teniendo como principal opción para la simulación del motor KIVA-UN.

En el primer capítulo se procede con el planteamiento del problema, la hipótesis y los objetivos del proyecto. El capítulo 2 presenta una revisión bibliográfica para establecer el marco teórico, centrándose en los modelos matemáticos y computacionales de KIVA-UN, los mecanismos de reacción para modelar la cinética de la combustión de gases derivados de biomasa, y los métodos de optimización aplicables en el problema en cuestión. El tercer capítulo expone el modelo y el dominio computacional desarrollados para KIVA, además se presenta el estudio de convergencia realizado para garantizar un tamaño de malla apropiado en la simulación del motor. En el cuarto capítulo se muestra el proceso de validación del modelo desarrollado, con base en resultados experimentales previamente obtenidos. En el capítulo 5 se procede con el acople entre el algoritmo y KIVA, además se presentan las características y los resultados del proceso de optimización computacional. Finalmente el capítulo 6 expone las conclusiones, aportes y recomendaciones del trabajo.

# 1. Planteamiento del problema

En los antecedentes internacionales se presentan estudios de combustión de gases de síntesis, enfocados en diversas ramas del proceso termoquímico, como lo es la formación de contaminantes específicos para formular estrategias de reducción [7, 28, 29] y estudios centrados en la dinámica de fluidos computacional para la caracterización de la llama y el cálculo de la liberación de energía [30, 31]. Por su parte los estudios nacionales encontrados se enfocan principalmente en las características específicas de llama para la combustión de gases de síntesis [32, 33, 34].

En el caso específico del uso de gases derivados de biomasa en MCI, se encuentran aplicaciones como combustible único [1, 4, 5, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 26, 27], o como aditivo a un combustible convencional [15, 16].

Los principales problemas del uso de gases derivados de biomasa en MCI, son la reducción de la energía liberada en la combustión y el aumento del tiempo de auto-encendido respecto a la operación del motor con un combustible convencional [1, 4, 5, 11, 14]. El poder calorífico inferior (LHV) condiciona directamente el rendimiento del motor, este último está asociado a variables como la eficiencia, la potencia y el consumo específico de combustible.

Esto se debe a que el LHV es el principal indicador de la energía química disponible en el combustible para ser transformada en energía mecánica por el motor [35]. Un LHV relativamente bajo, que es el caso de los gases de síntesis (generalmente menor a 18 [MJ/kg]), ocasiona que no se libere suficiente energía en la combustión, y por ende dificulta alcanzar la potencia y el rendimiento que se tienen alimentando el motor con un combustible fósil [11, 14]. Por otro lado, el retraso en el tiempo de encendido causa disminuciones en la potencia de salida y la eficiencia del motor, razón por la cual el uso de gases derivados de biomasa se prefiere en motores de encendido por chispa (MCI-SI) [4, 14].

Los alquitranes en la composición del gas incrementan drásticamente las EmC, por esta razón es indispensable un buen manejo y limpieza en el proceso de gasificación [12]. Entonces, con un proceso de gasificación limpio, se ha encontrado que la combustión de gases de síntesis genera bajas emisiones de material particulado, óxidos de azufre ( $\text{SO}_x$ ) e hidrocarburos sin quemar (HC), esto se debe a la baja presencia de hidrocarburos y azufre en la composición del combustible [8, 10, 13]. Sin embargo, la composición del gas también causa que las principales EmC de estos combustibles sean el CO, el  $\text{CO}_2$  y los  $\text{NO}_x$  [7, 8, 9, 13, 28, 29].

Las emisiones de CO y  $\text{CO}_2$  se deben principalmente a que antes de la combustión ya se tiene presencia de estas especies en la composición del gas de síntesis, razón por la cual la concentración de estas EmC suele ser más elevada para las mezclas ricas en combustible en comparación con las mezclas pobres [8, 9].

Por su parte, el contenido de  $\text{H}_2$  en la composición del combustible ocasiona que se alcancen elevadas temperaturas en la cámara de combustión, ocasionando que las emisiones de  $\text{NO}_x$  aumenten considerablemente respecto a la quema de combustibles convencionales [8, 9, 35].

De esta forma, este trabajo presenta, haciendo uso de la simulación y la optimización computacional, una solución particular para la combustión de un gas derivado de biomasa en un MCI-SI. Principalmente se busca minimizar las EmC de  $\text{NO}_x$ , y maximizar el rendimiento del motor, representado en parámetros como la eficiencia térmica indicada, el consumo específico de combustible indicado (ISFC), la presión media efectiva indicada (IMEP) y la potencia indicada (PI).

El desarrollo del proyecto de investigación, además de dar soluciones para aumentar la eficiencia y disminuir las EmC, presenta avances aplicables en trabajos futuros, en la combustión teórica de gases de síntesis y la simulación y optimización computacional de motores.

## 1.1 Hipótesis

El rendimiento y las emisiones de un MCI están directamente relacionados con las configuraciones y características del proceso de combustión que se da en su interior. Como se vio anteriormente, el incremento en el contenido de  $\text{H}_2$  en la composición inicial de la



mezcla aire-combustible causa que las emisiones de  $\text{NO}_x$  aumenten. De igual forma, este incremento también ocasiona un crecimiento de la energía liberada en la combustión, favoreciendo el rendimiento del motor y aumentando la potencia de salida [8, 26]. Basándose en los anteriores conceptos, es posible deducir que la composición de la mezcla inicial tiene un efecto importante en las EmC y en el rendimiento del motor.

De esta forma se espera que al alterar la composición en el proceso de optimización los objetivos se cumplan de manera inversa. Es decir que las composiciones de mezcla que presenten las menores EmC de  $\text{NO}_x$  es previsible que simultáneamente se caractericen por condicionar un rendimiento bajo en el motor. De igual manera en las mezclas que evidencien las mayores emisiones de óxidos de nitrógeno se obtendrán las eficiencias del motor más elevadas.

Para una composición del combustible constante, caso en el que se centra este trabajo, la relación aire-combustible es el único parámetro que permite modificar la composición de la mezcla inicial. Así, el contenido de  $\text{CO}$ ,  $\text{CO}_2$  y  $\text{H}_2$  en la mezcla inicial, disminuirá a medida que la relación aire-combustible aumenta y viceversa. En otras palabras la proporción de estas especies aumentará a medida que la mezcla se enriquece en combustible.

De esta forma, para un único combustible, la relación aire-combustible estequiométrica ( $AF_{stq}$ ) es constante, por lo que la relación de equivalencia ( $\phi$ ) representa directamente el comportamiento de la relación aire-combustible real ( $AF$ ), evidenciando claramente si se tiene una mezcla rica ( $\phi > 1$ ), pobre ( $\phi < 1$ ) o estequiométrica ( $\phi = 1$ ). Esto se muestra en la siguiente ecuación.

$$\phi = \frac{AF_{stq}}{AF} \quad (1)$$

En un MCI operado bajo un régimen constante en la carga y la velocidad de giro, las condiciones iniciales y en la admisión de presión y temperatura no cambian, manteniendo constante la masa de mezcla admitida a la cámara de combustión.

Por otro lado la relación aire combustible se define como la fracción de la masa de aire sobre la masa de combustible presentes en la mezcla, donde la masa de combustible más la masa de aire constituyen la masa total de la mezcla inicial. Entonces, si se tiene una masa de mezcla constante, la masa de combustible inyectada controlará directamente la

relación aire-combustible, la relación de equivalencia, y consecuentemente la composición de la mezcla inicial.

Existen diferentes mecanismos de formación de  $\text{NO}_x$ , el mecanismo térmico o de Zeldovich que consiste en la oxidación del nitrógeno del aire; el mecanismo del combustible que modela la formación de  $\text{NO}_x$  por la oxidación del nitrógeno presente en el combustible; y el mecanismo súbito que se centra en la reacción de hidrocarburos con moléculas de nitrógeno en el frente de llama [28, 29, 35, 38]. Sin embargo, la literatura concuerda en que para los motores la principal fuente de formación de estas EmC son las elevadas temperaturas en la cámara de combustión, es decir, los óxidos de nitrógeno formados por el mecanismo de Zeldovich. En este mecanismo la generación de  $\text{NO}_x$  crece de forma exponencial con el aumento de la temperatura en la cámara de combustión, razón por la cual también se le conoce como el mecanismo térmico de formación de  $\text{NO}_x$  [28, 29, 38].

En general, para los gases de síntesis el principal responsable de alcanzar altas temperaturas en la cámara es la combustión del  $\text{H}_2$  presente en su composición inicial [8, 26]. Esto llevaría a suponer que a medida que se incremente la masa de combustible inyectada, como aumenta el contenido de  $\text{H}_2$  en la mezcla inicial, también crezcan las emisiones de  $\text{NO}_x$ . Lo anterior sería una afirmación incompleta y solamente válida para mezclas pobres, ya que si la mezcla se enriquece lo suficiente en combustible, aunque existe mayor cantidad de hidrógeno, las emisiones de óxidos de nitrógeno disminuirán debido a que el exceso de combustible causa una reducción en la energía liberada [35, 38]. Así, teóricamente se puede afirmar que las mayores temperaturas en la cámara y por ende las emisiones de  $\text{NO}_x$  más elevadas se alcanzan generalmente para mezclas pobres cercanas a la estequiométrica [28, 29, 35, 38].

Por otro lado, el NO es la principal emisión de óxidos de nitrógeno, ya que es la que primero se forma, y los diferentes modelos teóricos coinciden en que es precursora para la formación de los demás  $\text{NO}_x$  [28, 29, 36, 37, 38]. Entonces, minimizar las emisiones de  $\text{NO}_x$ , en cierta medida se reduce a minimizar las emisiones de NO [36, 37].

La eficiencia térmica indicada ( $\eta_{thI}$ ), por su parte, es un parámetro cuantitativo que expone directamente el rendimiento del motor, ya que dicta la fracción de la energía suministrada en el combustible que efectivamente es transmitida por los gases de combustión al pistón [38, 39, 40], esto se puede observar en la ecuación (2).

$$\eta_{thI} = \frac{WI}{m_{fuel} * LHV} \quad (2)$$

En la mayoría de los casos, las mayores eficiencias en los motores se alcanzan para mezclas con una relación de equivalencia cercana a la unidad [38, 39, 40]. Esto se debe a que en las mezclas pobres existe poca energía disponible en la mezcla inicial, a causa de la escasez de combustible [35, 38]. Por el lado de las mezclas ricas, la falta de oxígeno y el exceso de combustible llevan a que gran parte de este último quede sin quemar y no se aproveche completamente la energía que se tiene inicialmente en la mezcla [35, 38].

Con base en las razones anteriormente expuestas, se plantea la optimización de la masa de combustible inyectado, para minimizar las emisiones de NO formado teóricamente por el mecanismo térmico de Zeldovich, y maximizar la eficiencia térmica indicada del motor. Para lograr este objetivo se propone el uso del algoritmo NSGA II y de KIVA para la simulación tridimensional del motor, esto debido a la trayectoria que estos tienen en la optimización computacional de motores [17, 26].

Cabe resaltar que para considerar el proceso de mezcla y formación de la relación de equivalencia en el MCI-SI, las simulaciones en este trabajo se llevan a cabo en ciclo abierto, teniendo en cuenta el sistema de válvulas y los procesos de admisión y escape.

Con la implementación del ciclo completo, al considerar una mayor cantidad de aspectos reales a los tenidos en cuenta en ciclo cerrado, se espera que el modelo desarrollado para KIVA presente resultados acordes a los obtenidos en pruebas experimentales previamente realizadas.

Finalmente, para evaluar los resultados de la optimización, los mismos se comparan respecto a la operación convencional del motor. En este proceso se busca que con el gas de síntesis en estudio existan algunas configuraciones que permitan obtener rendimientos en el motor y emisiones contaminantes similares o mejores a las que tiene el motor en su funcionamiento normal o de fábrica.

Sin embargo se prevé que bajo las mismas condiciones de operación, utilizando el gas de síntesis no sea posible alcanzar la potencia que entrega el motor alimentado con un combustible fósil, esto debido principalmente a la gran diferencia que existe en el LHV de ambos combustibles [14].

## 1.2 Objetivos

- **Objetivo general**

Optimizar la combustión premezclada de un gas derivado de la gasificación de biomasa, en un motor de combustión interna encendido por chispa, por medio de simulación computacional.

- **Objetivos específicos.**

- Validar el funcionamiento del software a utilizar (KIVA-UN), con base en resultados experimentales o computacionales, presentes en estudios previamente realizados.
- Modelar la cinética química que caracteriza el proceso de combustión estudiado.
- Modelar el comportamiento del fluido, planteando las ecuaciones de conservación de masa (especies), momento y energía, además de las ecuaciones de la turbulencia.
- Establecer los parámetros de entrada y salida, además del método de optimización a utilizar.
- Determinar la configuración optima del proceso de combustión de interés, con base en los parámetros y el método definidos previamente.

## **2. Marco teórico**

En este capítulo se presentan los modelos matemáticos y computacionales de dinámica de fluidos computacional que dispone el software KIVA-UN seleccionado para la simulación tridimensional del ciclo abierto del motor. También se hace un breve recuento de los modelos cinéticos, que según la literatura, son utilizables para modelar la combustión de gases de síntesis. Finalmente se presentan los diferentes métodos de optimización disponibles para MCI, centrándose en los GA y el método NSGA II.

### **2.1 Modelos CFD utilizados en KIVA-UN y mecanismos de reacción**

KIVA-UN es un software desarrollado en la Universidad Nacional de Colombia [41, 42, 43]. El desarrollo de este consistió básicamente en acoplar dos programas de software especializados, KIVA-4 y Cantera, esto con el objetivo principal de lograr obtener una herramienta computacional capaz de llevar a cabo simulaciones 3D de motores de combustión interna, utilizando mecanismos de reacción detallados o semidetallados [42].

KIVA es un programa basado en el método de volúmenes finitos [44, 45]. Fue desarrollado para simular los procesos térmicos, químicos y de fluidos que tienen lugar dentro de un MCI [46, 47]. Desde sus inicios, este software ha venido mejorando en diferentes aspectos de la simulación computacional de MCI. Los modelos matemáticos y la discretización espacial (mallado) del dominio, son algunos de los factores que se han mejorado desde la primera versión del software hasta la última (KIVA-4) [44, 45, 46, 47, 48, 49, 50]. Por su parte Cantera es un conjunto de herramientas computacionales, utilizadas para solucionar problemas relacionados con cinética química, termodinámica o procesos de transporte [41, 43, 51, 52, 53]. Cantera proporciona tipos de objetos que representan fases de materia, interfaces entre estas fases, redes de reactores dependientes del tiempo y flujos de reacción [51, 52]. Cantera se emplea actualmente para aplicaciones que incluyen combustión, detonaciones, conversión y almacenamiento de energía electroquímica. [51].

Cantera se puede utilizar con Python o Matlab, o en aplicaciones escritas en C++ o Fortran 90 [51, 52, 53]. Cantera soporta una gran variedad de mecanismos y reacciones, mucho más amplia de lo soportado por KIVA [42, 52]. De esta forma, el acople entre estos dos programas busca aprovechar las fortalezas de ambos [41, 43]. KIVA como plataforma principal para la simulación por CFD del motor, y Cantera para solucionar la cinética de reacción asociada al fenómeno de combustión que se da en estos dispositivos [42].

En los estudios por CFD, que involucran combustión de fluidos reactivos, es necesario establecer las ecuaciones que describen el comportamiento de los flujos dentro de la cámara o reactor que se esté modelando [54, 55]. Dichos flujos están gobernados por las ecuaciones de Navier-Stokes para fluidos compresibles y las ecuaciones de conservación de especies [35, 54, 55]. En este trabajo para simular la dinámica de fluidos y el proceso de combustión, se utilizan las ecuaciones y modelos incorporados en KIVA [42, 44, 45, 46, 47, 48, 49, 50, 56, 57, 58]. En el anexo A se muestran las ecuaciones que gobiernan las simulaciones realizadas en KIVA. En este anexo también se explica brevemente el esquema numérico y computacional de KIVA, y el acople entre KIVA y Cantera [42, 46, 47, 49, 50, 59, 60, 61, 62]. Finalmente, el anexo A presenta algunos de los mecanismos de reacción más utilizados para modelar la cinética química presente en la combustión de gases derivados de biomasa, donde adicionalmente se resume un estudio computacional realizado como parte de este proyecto que tuvo como principal objetivo evaluar el desempeño que tienen cuatro mecanismos de reacción semidetallados en la modelación de la cinética de combustión de gases de síntesis derivados de biomasa [7, 63, 64, 65, 66, 67, 68, 69, 70, 71, 72, 73, 74, 75, 76, 77].

## 2.2 NSGA II

En el anexo B se muestra una revisión bibliográfica concerniente a la optimización computacional de MCI y los algoritmos genéticos simples y multiobjetivo [17, 78, 79]. Esta sección se centra en el algoritmo genético multiobjetivo NSGA II, como alternativa principal para la optimización del motor. Los MOGA que utilizan la clasificación y la repartición no dominadas han sido criticados principalmente por la complejidad computacional, el enfoque no elitista y la necesidad de especificar un parámetro de compartición [80]. El NSGA II alivia estas tres dificultades, presentando un enfoque de clasificación rápido no dominado, un operador de selección que crea un grupo de parejas teniendo en cuenta

tanto a padres como a su descendencia, y seleccionado las mejores soluciones respecto a su aptitud y extensión [80].

Se ha evidenciado que el NSGA II en la mayoría de problemas, logra encontrar soluciones más diversificadas, y una mayor convergencia hacia el frente de Pareto, respecto a otros MOGA elitistas, además de tener mayor aplicabilidad a problemas de optimización multiobjetivo más complejos y reales [80]. En primer lugar es necesario definir el concepto de dominancia. Se dice que un individuo “i” domina a otro “j” siempre y cuando la solución del individuo “i” sea mejor o igual, para todas las funciones objetivo, que la solución del individuo “j” [81]. En otras palabras, en la comparación de dos individuos, el que más se acerque al frente de Pareto dominará al otro, es decir el que supere simultáneamente el óptimo en todas las funciones objetivo, este concepto se ilustra en la figura 1 para la minimización de dos objetivos. Basándose en esto, en cada generación, el algoritmo NSGA II clasifica las soluciones en diferentes frentes, con la ayuda de un parámetro denominado *ranking* [81]. Los individuos del frente de Pareto tendrán un *ranking* igual a 1, y serán aquellos que no se encuentren dominados por ningún otro individuo. De esta forma, el segundo frente, de *ranking* igual a 2, estará compuesto por individuos que solo estén dominados por uno más individuos pertenecientes al primer frente. Finalmente las soluciones del frente de *ranking* igual a K, solo podrán estar dominadas por soluciones que pertenezcan a los frentes de *ranking* igual o menor a K-1 [81].

Por otro lado, para tener en cuenta la diversidad genética, este algoritmo estima la densidad de soluciones que rodean una solución en particular [80]. Para esto se calcula la distancia media de dos puntos, uno a cada lado del individuo en cuestión, a lo largo de cada función objetivo [80]. Estos valores sirven para estimar el perímetro que se forma alrededor de dicha solución, teniendo a los vecinos más cercanos como vértices [80]. Cabe resaltar que para los individuos que se encuentren en los extremos (máximo o mínimo), la distancia media tendrá un valor de infinito, las demás soluciones tendrán un valor de distancia normalizado, buscando que todas las funciones objetivo tengan la misma influencia [81]. A la suma de las distancias para cada función objetivo, se le conoce como distancia de aglomeración, y es el parámetro cuantitativo que sirve para evaluar la diversidad genética, evidentemente a mayor distancia de aglomeración más diversa es la solución en cuestión [80]. Para introducir el elitismo, en las evaluaciones de la generación actual, se involucran, además de las soluciones que la componen (población de tamaño N), los mejores individuos evaluados en generaciones anteriores [80]. Así, se crea una

población de tamaño  $2 \cdot N$ , la cual se someterá a un torneo, en el que cada individuo se enfrenta a cada uno de los demás, para seleccionar a los  $N$  mejores, que serán los padres de la siguiente generación [81]. En cada enfrentamiento los criterios y el orden de los mismos para elegir un vencedor son los siguientes [81].

- 1) Si se tiene un problema de optimización restringida, se elige al individuo que no viole ninguna restricción, es decir al individuo factible.
- 2) Si ambos individuos son factibles, se elige el que es dominante sobre el otro, en otras palabras el que tenga un menor valor de *ranking*.
- 3) Si ambos pertenecen al mismo frente, se elige al que se encuentre en la región menos concurrida, es decir el que tenga una mayor distancia de aglomeración.

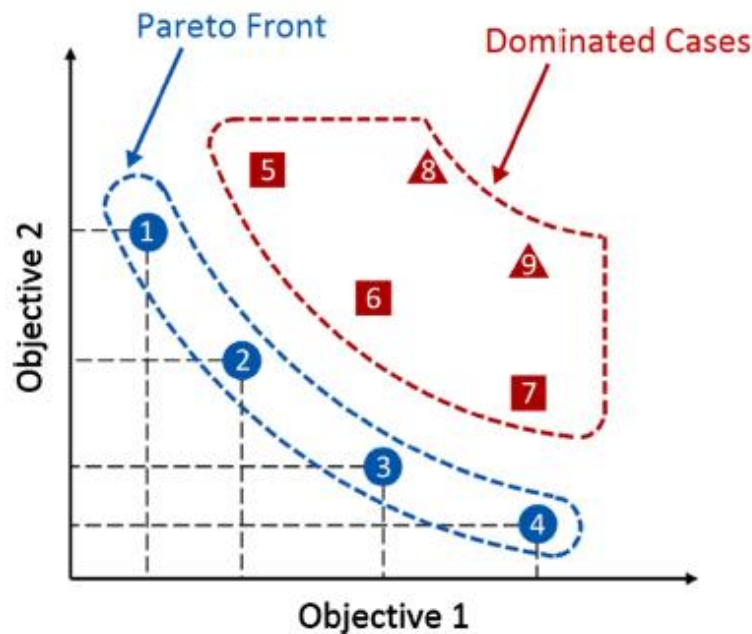


Figura 1. Ilustración de los conceptos de dominancia y frente de Pareto. Fuente: [26].

En la optimización restringida puede suceder que ambas soluciones violen alguna restricción, es decir que ambas soluciones sean no factibles o inviables, si esto sucede se elige la solución que realice menos violaciones, o la violación global más pequeña (la violación global es la suma de las violaciones normalizadas), si dicha violación tiene la misma gravedad para ambos individuos se evalúan los criterios 2 y 3 para elegir el vencedor [80]. Finalmente cabe anotar que el algoritmo NSGA II usa los mismos operadores habituales para el cruce y la mutación, que la mayoría de GA, para crear la población definitiva de descendientes [80].



### **3. Modelo desarrollado y convergencia de malla**

En el laboratorio de motores de la universidad de Zaragoza [8], se estudió experimentalmente el comportamiento de un motor Lombardini LGW-523-MPI [91, 92] alimentado con gases de síntesis derivados de un biogás compuesto molarmente por 60 [%] de  $\text{CH}_4$  y 40 [%] de  $\text{CO}_2$  [8]. Se compararon los resultados encontrados con los obtenidos al alimentar el motor con gasolina, metano y biogás. Los gases de síntesis se obtuvieron por descomposición catalítica del biogás (los gases de síntesis se componen por  $\text{H}_2$ ,  $\text{CO}$ ,  $\text{CH}_4$  y  $\text{CO}_2$ ), además las pruebas se realizaron en un amplio rango de velocidades y para tres relaciones de equivalencia [8].

El autor principal de dicho estudio, el ingeniero Jorge Arroyo, junto con el ingeniero George Kosmadakis de la universidad de Atenas quien trabajó en el desarrollo de un modelo del motor Lombardini LGW-523-MPI [82], proporcionaron los datos suficientes para desarrollar el modelo del motor, y para su posterior validación [83, 84].

Entre los datos obtenidos, se encuentran las condiciones de operación, las especificaciones técnicas y geométricas del motor, emisiones contaminantes y presiones en la cámara de combustión; todo esto para diferentes combustibles y para 2500 y 4500 [RPM] [8, 82].

De esta forma, la tesis presentada se centra en el estudio computacional y posterior optimización de la masa inyectada de combustible al motor Lombardini LGW-523-MPI, específicamente para su alimentación con uno de los gases de síntesis estudiados por Arroyo en [8].

El motor Lombardini LGW-523-MPI es de cuatro tiempos, debido a esto y al querer estudiar el ciclo completo o abierto del motor las simulaciones se llevan a cabo en el rango temporal comprendido entre 0 y 720 [CAD]. De esta forma el PMS de máxima presión corresponde a 360 [CAD].

### 3.1 Mallado del MCI-SI

Inicialmente, para poder discretizar cualquier dominio computacionalmente es necesario conocer su geometría, con base en esto la tabla 1 presenta algunos datos del motor a enmallar. Sin embargo es posible notar que no se tienen todos los datos necesarios para describir completamente el dominio del motor. Por esta razón se realiza un análisis de imagen de las vistas del motor ilustradas en la figura 2-a, con base en los datos conocidos, que tiene por objetivo recolectar datos concernientes al cuenco del pistón, las válvulas y sus puertos y la posición de la bujía, necesarios para conocer completamente la geometría del motor.

Tabla 1. Datos del motor Lombardini LGW-523-MPI. Fuente: [8, 82, 83, 84].

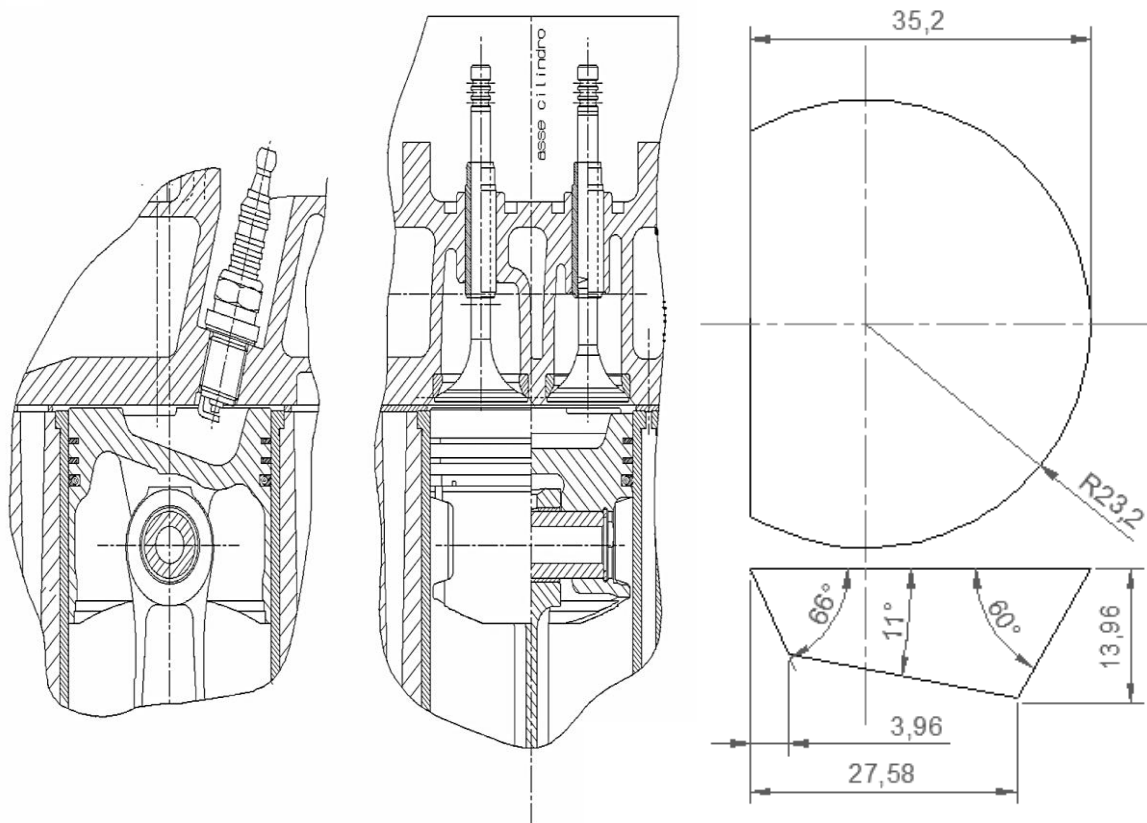
Parámetro	Valor	Unidades
Numero de cilindros	2	[-]
Diámetro del pistón	0,072	[m]
Relación de compresión	10,7	[-]
Carrera	0,062	[m]
Longitud de la biela	0,107	[m]
Diámetro de la válvula de admisión	0,033	[m]
Levantamiento de la válvula de admisión	10	[mm]
Diámetro de la válvula de escape	0,029	[m]
Levantamiento de la válvula de escape	7	[mm]
Apertura de la válvula de escape	57	BBDC
Cierre de la válvula de escape	7	ATDC
Apertura de la válvula de admisión	5	BTDC
Cierre de la válvula de admisión	59	ABDC

Como resultado de este análisis se modeló el dominio computacional en un software de diseño asistido por computador, de lo cual se dedujo que el cuenco de este motor es un hueco cónico en el pistón con dos truncamientos, según se muestra en la figura 2-b.

También fue posible concluir que los puertos y ductos tienen un diámetro aproximado de 31 [mm] en la admisión y 27 [mm] en el escape. Los puertos tienen una altura de 40 [mm] y los vástagos de las válvulas se modelaron con un diámetro de 7 [mm]. Por otro lado los alojamientos se modelaron con una altura de 2.5 [mm] y un diámetro de 36 [mm] en la admisión y 31 [mm] en el escape. Finalmente también se encontró que la chispa se localiza sobre el punto más profundo del cuenco, a 0.5 [mm] de la culata y se modeló con un volumen de 0.25 [cm<sup>3</sup>].

Después de tener completamente definida la geometría (forma y dimensiones) del dominio, empieza el proceso de enmallado. El motor Lombardini LGW-523-MPI es de encendido por chispa, tiene dos válvulas por cilindro, y su pistón tiene un cuenco descentrado. Debido a esto la malla para dicho motor no es realizable utilizando únicamente las herramientas de mallado que existen en la actualidad para KIVA 4.

Por esto, fue necesario desarrollar una nueva metodología aplicable para motores con válvulas y cuencos asimétricos (cuencos que no se pueden obtener por revolución). Dicha metodología se basa en el uso del enmallador convencional de KIVA K3PREP, generadores de malla libres de código abierto; y en el uso de un código desarrollado como parte de este trabajo [85]. Esta metodología se encuentra en proceso de preparación y corrección para su publicación y puede ser consultada con mayor profundidad en [85].



a) Vistas lateral y frontal del motor Lombardini LGW-523-MPI. Fuente: [83, 84].

b) Geometría del cuenco modelado. Dimensiones en [mm].

Figura 2. Análisis de imagen, motor Lombardini LGW-523-MPI.

## 3.2 Modelo desarrollado

Según los datos suministrados, para la inyección de los combustibles gaseosos al motor Lombardini LGW-523-MPI fue necesario realizar el montaje de un inyector en un bloque de 50 [mm] de ancho, el cual se localiza entre el múltiple de admisión y el bloque del motor [83]. Además, el objetivo del desarrollo del modelo del motor considerando las válvulas tanto de admisión como de escape, es tener en cuenta el impacto que estas tienen en la magnitud de la turbulencia y consecuentemente en la calidad de la mezcla, razón por la que no es admisible alimentar el dominio con el combustible y el comburente premezclados homogéneamente, sino que estos deben entrar por partes diferentes del motor, coincidentes con el montaje experimental desarrollado en [8].

Sin embargo esto representa un problema para los modelos matemáticos y computacionales existentes en KIVA. En primer lugar el modelo de inyección que dispone el software admite únicamente que ciertas especies sean inyectadas, y el combustible en estudio está compuesto por especies que el software no considera para la inyección [49]. Por otro lado, aunque el software admite que el dominio tenga un número cualquiera de fronteras de entrada, ya sean *dirichlet* de presión o velocidad, solo se permite definir un grupo de condiciones, el cual afectará a todas las fronteras de entrada que se tengan [46]. En otras palabras si se tienen dos fronteras de entrada de presión, por ambas entraran las especies consideradas a la misma presión.

Por estas razones el modelo desarrollado para el motor Lombardini LGW-523-MPI, considera una sola frontera de entrada, y presenta un depósito de combustible con un volumen de 7.9845 [cm<sup>3</sup>]. El dominio computacional del motor se explicará a continuación, haciendo uso de la figura 3.

- Región 1 (Cámara de Combustión). Esta región está compuesta por el cilindro del motor, el cuenco del pistón y parte del alojamiento de las válvulas de admisión y escape. Sus condiciones iniciales son la misma presión y temperatura que se tiene en la admisión, y la masa inicial es el comburente. Esta región no tiene fronteras abiertas del dominio.
- Región 2 (Admisión). Esta región está compuesta por el ducto de admisión, el puerto de la válvula de admisión y parte del alojamiento de la válvula de admisión. Sus condiciones iniciales son la presión y temperatura

predeterminadas para la admisión, y la masa inicial está compuesta únicamente por el comburente. La frontera izquierda de esta región es el límite de entrada de presión al dominio, que es la misma presión de admisión.

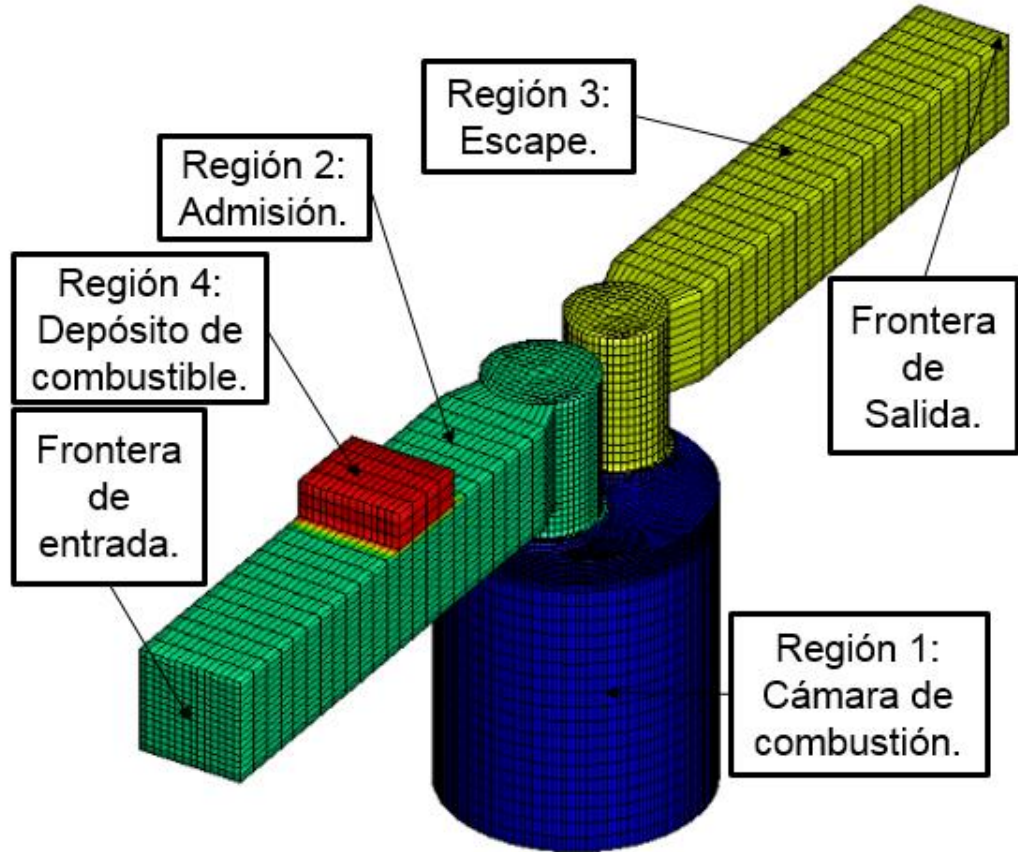


Figura 3. Regiones existentes en el dominio desarrollado para el motor Lombardini LGW-523-MPI. Azul oscuro: región 1, verde: región 2, amarillo: región 3, rojo: región 4.

- Región 3 (Escape). Esta región está compuesta por el ducto de escape, el puerto de la válvula de escape y parte del alojamiento de la válvula de escape. Sus condiciones iniciales son la misma presión de la región 2, la temperatura inicial es la misma que se tiene en la admisión, y la masa inicial está compuesta únicamente por el comburente. La frontera derecha de esta región es el límite de salida de presión del dominio, y coincide en magnitud con la presión de la frontera de entrada en la región 2.
- Región 4 (Depósito de combustible). En esta región se encuentra al inicio de la simulación el combustible necesario para simular un ciclo del motor. La

temperatura inicial es la misma que se tiene en la región 2, la presión inicial se calcula haciendo uso de la ley de gases ideales, para el volumen del depósito, y para la masa de combustible por ciclo deseada. Esta región no tiene fronteras abiertas del dominio.

Por otro lado, para todo el dominio computacional la energía cinética turbulenta y la longitud de escala turbulenta son nulas de la misma forma que el *swirl* inicial (*swirl*: giro de la mezcla alrededor del eje axial del cilindro del motor). Esta configuración tiene por objeto que el proceso de admisión sea el que se encargue de generar turbulencia en la cámara de combustión sin que estas variables tengan magnitudes iniciales de carácter artificial.

Por su parte, en el modelo desarrollado para KIVA las fronteras cerradas o paredes del dominio se modelan con una condición *dirichlet* de temperatura constante y utilizando la ley de pared turbulenta [46, 47].

Estas paredes se dividen en cuatro tipos, dependiendo de la magnitud de temperatura que las caracteriza. El primero corresponde a las paredes no móviles excluyendo la culata del motor, como ejemplo se encuentran la camisa, y las paredes de los puertos y ductos de admisión y escape; estas paredes permanecen a una temperatura de 380 [K]. La culata o cabeza del motor tiene una temperatura de frontera igual a 443 [K]. Por su parte el pistón, incluyendo el cuenco del mismo, está a una temperatura de 500 [K]. Finalmente las superficies de las válvulas de admisión y escape se encuentran a temperaturas iguales a 372 [K] y 443 [K], respectivamente. Los valores de las temperaturas de frontera se determinan a partir de los datos experimentales y consideraciones teóricas [8, 38, 39, 83].

Terminando, se tiene que el modelo desarrollado busca que en el proceso de admisión entre a la región 1 parte del combustible depositado inicialmente en la región 4, y el aire necesario proveniente de la frontera abierta situada en la región 2, para garantizar la masa de mezcla y la relación de equivalencia deseadas en la cámara de combustión a partir del ajuste de las presiones iniciales en todo el dominio computacional. Con esto se busca considerar con la mayor fidelidad posible el proceso de mezcla que se tiene en el motor real. Cabe resaltar que el comburente para este trabajo siempre es aire compuesto molarmente por un 79% de nitrógeno y un 21% de oxígeno. Finalmente el combustible seleccionado es el gas de síntesis 2 estudiado en [8], esto debido a que es el de mayor LHV y mayor contenido de  $H_2$ , que como se vio en la revisión bibliográfica, es benéfico para el rendimiento del motor [8, 26].

### 3.3 Convergencia de malla

Como se evidencia en un estudio encontrado, los procesos de independencia de malla en motores de combustión interna se pueden realizar estudiando el impacto del tamaño de malla en la turbulencia presente en el dominio [86]. Esto se debe a que la turbulencia condiciona la calidad de la mezcla y consecuentemente la solución de la cinética química del fenómeno [86, 87]. Por esta razón en programas de software CFD como KIVA, que usan modelos  $k-\epsilon$  (RANS), dicho impacto puede cuantificarse basándose en los valores de la energía cinética turbulenta (TKE) o de la longitud de la escala turbulenta (SCL) [86, 87, 88]. Esto se debe a que dichas variables describen la turbulencia que se tiene en el dominio del motor, y presentan considerables gradientes espaciales a lo largo de la simulación [86, 88]. Por otro lado en KIVA, como se muestra en el anexo A.1, la cinética de combustión depende únicamente del tiempo y no presenta gradientes espaciales, entrando como un término fuente en las ecuaciones de conservación. Por esta razón es viable realizar las simulaciones de convergencia de malla en frío o *motored* (simulación completa del fenómeno a excepción de la combustión), [42, 46, 47, 50, 89].

El estudio de convergencia de malla presentado evalúa para simulaciones en frío la influencia que tiene el número de elementos en la malla del motor, sobre la evolución temporal de la TKE y la SCL en la cámara de combustión. Las características de las mallas evaluadas se presentan en la tabla 2.

Tabla 2. Mallas evaluadas en el proceso de convergencia.

Malla N°	Número de celdas en el dominio				
	Región 1	Región 2	Región 3	Región 4	Total
1	41716	5004	3468	72	50260
2	57856	8368	6012	168	72404
3	67072	8368	6012	168	81620
4	76928	10160	6012	168	93268
5	86784	10160	7020	168	104132
6	93696	11420	7884	210	113210
7	135664	21168	15276	432	172540
8	201110	33228	23652	600	258590
9	295878	87520	62604	1560	447562

Para cuantificar la influencia del tamaño de malla se calculan las variaciones relativas que presentan las variables de interés a medida que aumenta el número de celdas en el dominio; de esta forma el estudio de convergencia de malla se detiene cuando estas

variaciones no presentan un cambio significativo. El caso ilustrado en la tabla 3 no cambia para las simulaciones realizadas en el estudio de convergencia de malla, entre dichas simulaciones la única diferencia es el número de elementos que tiene el mallado del dominio del motor.

Tabla 3. Caso de simulación en el estudio de convergencia de malla y composición del gas de síntesis 2 estudiado en [8]. Fuente: [8, 83].

Variable	Valor	Unidad
Presión de admisión	72,38028767	[kPa]
Presión inicial en el depósito de combustible	909,1371197	[kPa]
Velocidad del motor	2500	[RPM]
Temperatura de admisión	300,84104	[K]
Composición del combustible	Fracción Molar	Unidad
H2	0,4	-
CO	0,39	-
CH4	0,11	-
CO2	0,1	-

### 3.3.1 Verificación de las relaciones de compresión y expansión

Para tener una emulación real del proceso de combustión, es necesario garantizar el cumplimiento de las relaciones de compresión real y volumétrica, y la relación de expansión real que tiene el motor Lombardini LGW-523-MPI. Con base en esto, para todas las mallas evaluadas debe verificarse el cumplimiento de dichas relaciones, con este objetivo se desarrolló el procedimiento que se explica a continuación. Las relaciones de compresión volumétrica y real, y la relación de expansión real se definen respectivamente como sigue.

$$RC_{vol} = \frac{V_{PMI}}{V_{PMS}} \quad (3)$$

$$RC_{real} = \frac{V_{CVA}}{V_{PMS}} \quad (4)$$

$$RE_{real} = \frac{V_{AVE}}{V_{PMS}} \quad (5)$$

El motor tiene una relación de compresión volumétrica de 10,7 y real de 8,87028, y una relación de expansión real de 8,99108. Para garantizar el cumplimiento de la relación de compresión volumétrica es recomendado ajustar la distancia entre el pistón y la culata en



el punto muerto superior (PMS) [45, 46, 49]. Sin embargo, para los motores con relaciones de compresión elevadas y que además tienen cuencos o precámaras, dicha distancia debe tomar valores muy pequeños, lo que ocasiona que el algoritmo de regeneración de la malla para el movimiento del pistón y las válvulas en KIVA, falle cerca al PMS. Por esta razón, en este caso, se configura esta distancia con el valor más pequeño posible (en el modelo desarrollado esta distancia tiene un valor de 5 [mm]) y para garantizar la  $RC_{vol}$  se ajusta la carrera del motor en un proceso iterativo calculándola como sigue.

$$stroke = 4 * V_{PMS} * \frac{RC_{vol} - 1}{\pi * bore^2} \quad (6)$$

Donde *stroke* es la carrera calculada para la iteración actual y *bore* es el diámetro del pistón. El proceso de verificación iterativo consiste en realizar simulaciones para evaluar el cumplimiento de las relaciones  $RC_{vol}$ ,  $RC_{real}$ ,  $RE_{real}$ . Éstas son simulaciones *no-hydro* (en este tipo de simulaciones solo se estudia el movimiento de las válvulas y el pistón, sin solucionar el fluido y la combustión), considerando que las válvulas siempre se encuentran cerradas, esto para tener una lectura confiable del volumen en la cámara. Cabe aclarar que en la ecuación anterior el volumen en el punto muerto superior ( $V_{PMS}$ ) corresponde al resultante de la simulación en la iteración anterior.

Entonces la carrera calculada se reemplaza en las condiciones de entrada y en la generación de la malla para realizar una nueva simulación. Para todas las mallas evaluadas la carrera definitiva siempre es cercana a 8,24 [cm]. Por otro lado, para garantizar el cumplimiento de las relaciones de compresión y expansión reales, se ajustan los tiempos de válvulas, calculando como sigue cuanto deben adelantarse o retrasarse, tanto para la admisión como para el escape [39].

$$s_{CVA} = 4 * \frac{V_{PMS}(1 - RC_{real})}{\pi * bore^2} + r + a \quad (7)$$

$$s_{AVE} = 4 * \frac{V_{PMS}(1 - RE_{real})}{\pi * bore^2} + r + a \quad (8)$$

$$\theta_{CVA} = 360 - \cos^{-1} \left( \frac{s_{CVA}^2 - r^2 + a^2}{2 * s_{CVA} * a} \right) \quad (9)$$

$$\theta_{AVE} = 360 + \cos^{-1} \left( \frac{s_{AVE}^2 - r^2 + a^2}{2 * s_{AVE} * a} \right) \quad (10)$$

$$d\theta_{Ad} = \theta_{CVA} - \theta_{CVA_{real}} \quad (11)$$

$$d\theta_{Es} = \theta_{AVE} - \theta_{AVE_{real}} \quad (12)$$

Donde:

- $s_{CVA}$  es la posición del pistón medida desde el eje del cigüeñal, en el momento en que se cierra la válvula de admisión.
- $s_{AVE}$  es la posición del pistón medida desde el eje del cigüeñal, en el momento en que se abre la válvula de escape.
- $r$  es la longitud de la biela (tabla 1).
- $a$  es la longitud de la manivela, la cual es igual a la mitad de la carrera que garantiza el cumplimiento de la  $RC_{vol}$ .
- $\theta_{CVA}$  es el ángulo del cigüeñal que debe tener el modelo en el momento en que se cierra la válvula de admisión, para garantizar la  $RC_{real}$ .
- $\theta_{AVE}$  es el ángulo del cigüeñal que debe tener el modelo en el momento en que se abre la válvula de escape, para garantizar la  $RE_{real}$ .
- $\theta_{CVA_{real}}$  es el ángulo del cigüeñal que tiene el motor real en el momento en que se cierra la válvula de admisión (tabla 1).
- $\theta_{AVE_{real}}$  es el ángulo del cigüeñal que tiene el motor real en el momento en que se abre la válvula de escape (tabla 1).
- $d\theta_{Ad}$  estipula cuantos ángulos del cigüeñal deben moverse los tiempos de la válvula de admisión para garantizar la  $RC_{real}$ .
- $d\theta_{Es}$  estipula cuantos ángulos del cigüeñal deben moverse los tiempos de la válvula de escape para garantizar la  $RE_{real}$ .

Finalmente basándose en los valores de  $d\theta_{Ad}$  y  $d\theta_{Es}$  los tiempos de válvulas cambian. Si  $d\theta$  es positivo ocurrirá un retraso y si es negativo un adelanto en los tiempos de válvula. Para todas las mallas evaluadas los tiempos de la válvula de admisión se retrasan cerca de 3°, y los tiempos de la válvula de escape se adelantan cerca de 3°. Evidentemente no es posible garantizar exactamente cualquier relación de compresión o expansión, esto

debido entre otras cosas al limitado número de cifras significativas que toma el software en sus cálculos. Por esta razón se toma como criterio que el error admisible de la relación en cuestión del modelo respecto a la del motor real debe ser menor al error relativo máximo que KIVA permite en la solución implícita de la difusión de masa (este error tiene un valor del 0,1 %) [46, 47, 49, 50]. En la tabla 4 se muestra para cada una de las mallas las relaciones  $RC_{vol}$ ,  $RC_{real}$ ,  $RE_{real}$ , y el error de cada una de estas respecto a las relaciones del motor real. Es posible observar que para todas las mallas el error se mantiene por debajo del 0,1 %, por lo que se deduce que presentan relaciones admisibles, las cuales no involucrarán un error mayor al permitido.

Tabla 4. Verificación para cada una de las mallas evaluadas, de las relaciones  $RC_{vol}$ ,  $RC_{real}$ ,  $RE_{real}$ .

Malla N°	$RC_{vol}$	Error $RC_{vol}$ [%]	$RC_{real}$	Error $RC_{real}$ [%]	$RE_{real}$	Error $RE_{real}$ [%]
1	10,691925	0,075467	8,875861	0,062922	8,999193	0,090256
2	10,699366	0,005930	8,875580	0,059752	8,999139	0,089660
3	10,699366	0,005929	8,875419	0,057942	8,999109	0,089319
4	10,699366	0,005929	8,875248	0,056007	8,999076	0,088955
5	10,699366	0,005929	8,875076	0,054071	8,999043	0,088591
6	10,699366	0,005928	8,875108	0,054431	8,999057	0,088742
7	10,708380	0,078315	8,875301	0,056614	8,999139	0,089662
8	10,708501	0,079447	8,875603	0,060019	8,999268	0,091095
9	10,701430	0,013363	8,876041	0,064949	8,999455	0,093171

### 3.3.2 Resultados y análisis

Después de construir las mallas a evaluar y garantizar que cumplen las relaciones de compresión y expansión, se realizan las simulaciones en frío para obtener los resultados que permitan hacer el estudio de convergencia. La figura 4 muestra los resultados obtenidos. En la figura 4-a se observa que sin importar el número de elementos que tenga la malla, la presión en la cámara no muestra diferencias tangibles, esto se debe a que en la cámara de combustión la presión tiene gradientes espaciales despreciables, por lo que su resultado no es dependiente del tamaño de malla.

Por su parte la TKE si presenta diferencias a medida que se incrementa el número de celdas, la figura 4-b muestra que las mayores diferencias y los mayores valores de este

parámetro se presentan al inicio de la simulación entre 0 y 180 [CAD], lo que se debe al proceso de admisión, más específicamente a la interacción con la válvula y a la entrada de combustible y comburente a la cámara de combustión. No obstante, también se observa que después de la malla 4 los valores de la TKE convergen y no presentan diferencias tangibles en esta figura. Por otra parte en las simulaciones realizadas la TKE inicial es cero, por lo que su crecimiento al inicio de la simulación y los valores que presenta a lo largo del ciclo se deben principalmente a los procesos de admisión y escape, la influencia del cuenco y el movimiento del pistón.

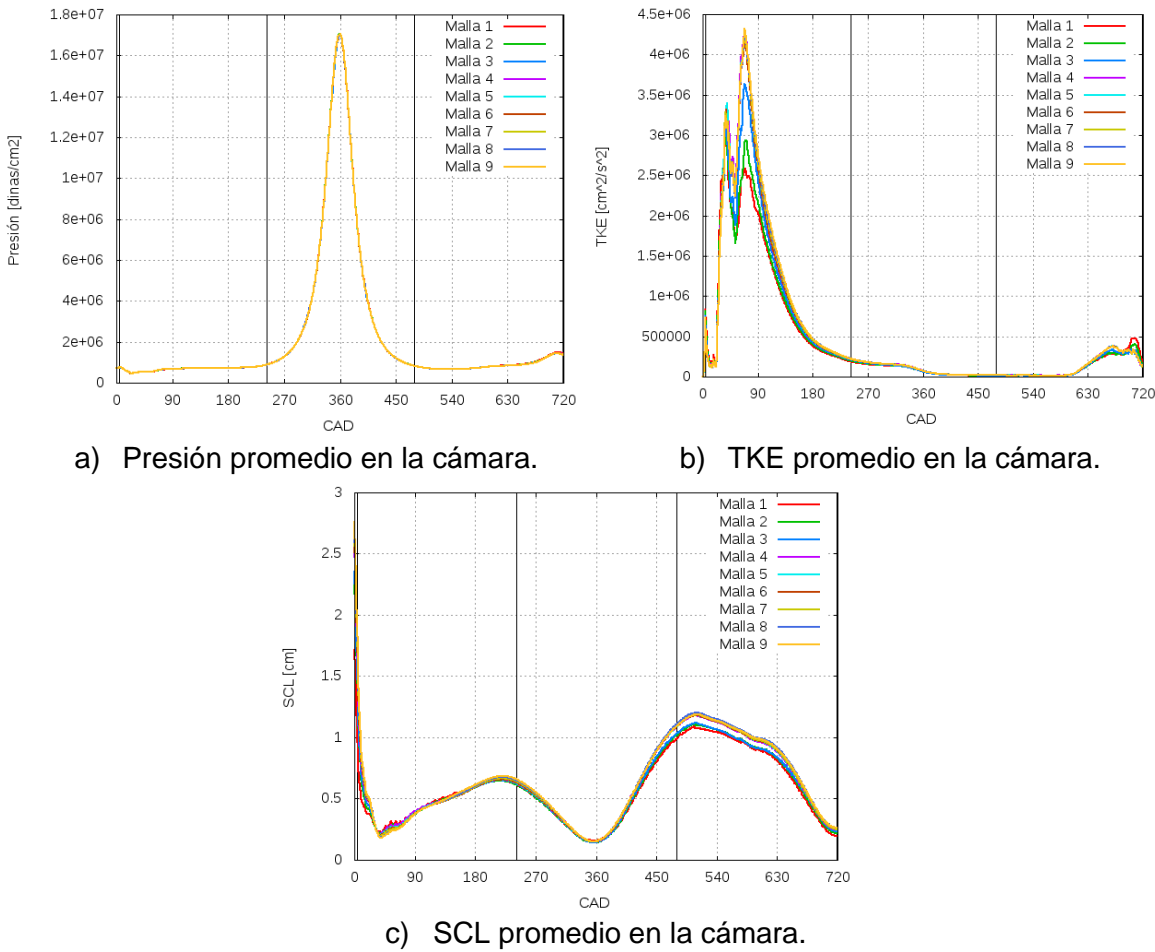


Figura 4. Evolución temporal del promedio en la cámara de combustión de la presión, la TKE y la SCL. Para diferentes mallas simuladas en frío.

Finalmente la figura 4-c evidencia que de forma análoga a la TKE, la SCL en la cámara se ve afectada por el tamaño de malla, sin embargo nuevamente a partir de la malla 4 los valores de la SCL convergen, en este caso las mayores diferencias se presentan al final

del ciclo entre 450 y 720 [CAD], esto se debe al efecto combinado que tiene la expansión de la cámara y el proceso de escape, cabe resaltar que como era de esperarse el punto de menor SCL coincide con el PMS de máxima presión. El comportamiento similar entre la TKE y la SCL se debe principalmente a la relación que estos parámetros tienen entre sí, ya que se cumple que  $SCL \propto \frac{TKE^{1,5}}{\epsilon}$ . Esta es la razón por la cual en la literatura se enuncia que si entre la SCL y la TKE, alguna de las dos converge, la solución de la combustión en el motor también lo hará [84], es decir que solo es necesario garantizar la convergencia en alguno de los dos parámetros.

Entonces, para cuantificar las diferencias que presentan las variables en cuestión a medida que aumenta el número de celdas en el motor, se calculan las variaciones relativas de la presión, la TKE y la SCL promedios en la cámara de combustión, para cada paso de tiempo en la simulación, y se obtiene el promedio para todo el dominio temporal. Así, el cálculo de variaciones para la  $i$ -ésima malla se realiza como sigue.

$$ErX_i^n = 100 * \frac{abs(X_i^n - X_{i-1}^n)}{X_{i-1}^n} \quad (13)$$

$$ErX_i = \frac{\sum_{n=1}^N ErX_i^n}{N} \quad (14)$$

Donde  $X_i^n$  es el valor de la variable X (presión, TKE o SCL) para la malla  $i$  en el paso de tiempo  $n$ ,  $X_{i-1}^n$  es el valor de la variable X para la malla  $i - 1$  en el paso de tiempo  $n$ ,  $ErX_i^n$  es la variación relativa que presenta la malla  $i$  respecto a la malla  $i - 1$  en la variable X para el paso de tiempo  $n$ ,  $N$  es número de pasos de tiempo evaluados, para este caso  $N$  siempre es igual a 720, y  $ErX_i$  es la variación relativa promedio que presenta la malla  $i$  respecto a la malla  $i - 1$  en la variable X para todo el dominio temporal.

En la figura 5, se plasma el comportamiento de la variación relativa promedio respecto al número de celdas totales en el dominio, para las tres variables evaluadas en el estudio de convergencia. Se observa que la presión presenta variaciones despreciables las cuales se encuentran siempre por debajo del 0,4 % y generalmente menores al 0,2 %, con una desviación estándar global aproximada de 0,118 %. Esto evidencia la poca dependencia que tiene la presión respecto al tamaño de malla, lo que hace inviable realizar estudios de convergencia de malla basados en los valores promedio de presión en la cámara.

La TKE por su parte siempre presenta variaciones por encima del 1 % con un máximo de 13,4 %, sin embargo después de 104132 elementos la variación empieza a estabilizarse y se acota entre 1 y 1,73 %, presentando a partir de este punto una desviación estándar aproximada de 0,266 %.

Finalmente la SCL tiene una variación mínima de 0,63 % y máxima de 4 %, análogamente a partir de 104132 elementos en el dominio, la variación tiende a estabilizarse manteniéndose entre 0,63 % y 1,74 %, con una desviación estándar aproximada de 0,413 %. También se observa que para la SCL y la TKE se presentan picos en la variación para 93268 y 258590 celdas, mientras que las menores variaciones están para 104132 y 113210 elementos respectivamente.

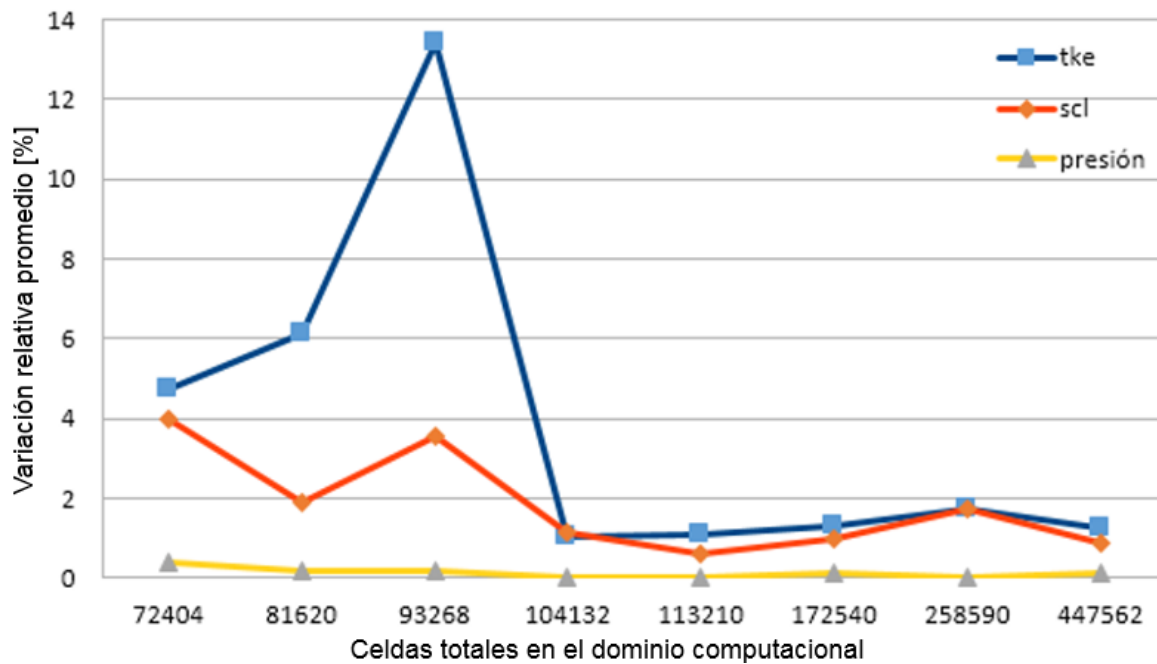


Figura 5. Variación relativa promedio en los valores de presión, TKE y SCL, respecto al número de celdas en todo el dominio computacional.

Basándose en los resultados obtenidos en el estudio de convergencia, y en el análisis hecho previamente se selecciona para simular el motor Lombardini LGW-523-MPI la malla de 104132 celdas (malla 5). Por otro lado para mallas más finas las variaciones en la TKE y la SCL convergen, por lo que la mezcla no se altera considerablemente después de 104132 elementos. Además los valores de desviación estándar en la variación promedio no ameritan el uso de mallas con más celdas, ya que pueden incrementar

considerablemente el costo computacional. En la figura 6 se ilustra gráficamente la malla seleccionada al terminar el estudio de convergencia.

La magnitud de la velocidad de giro del motor puede afectar los resultados de un estudio de convergencia, esto debido a que la turbulencia en la cámara es dependiente de la velocidad a la que se mueve el pistón [84, 85, 86, 87]. Por esta razón es necesario comprobar los resultados de la convergencia de malla a la velocidad más alta a la que se va a simular el motor, identificando las variaciones que se tienen bajo este régimen.

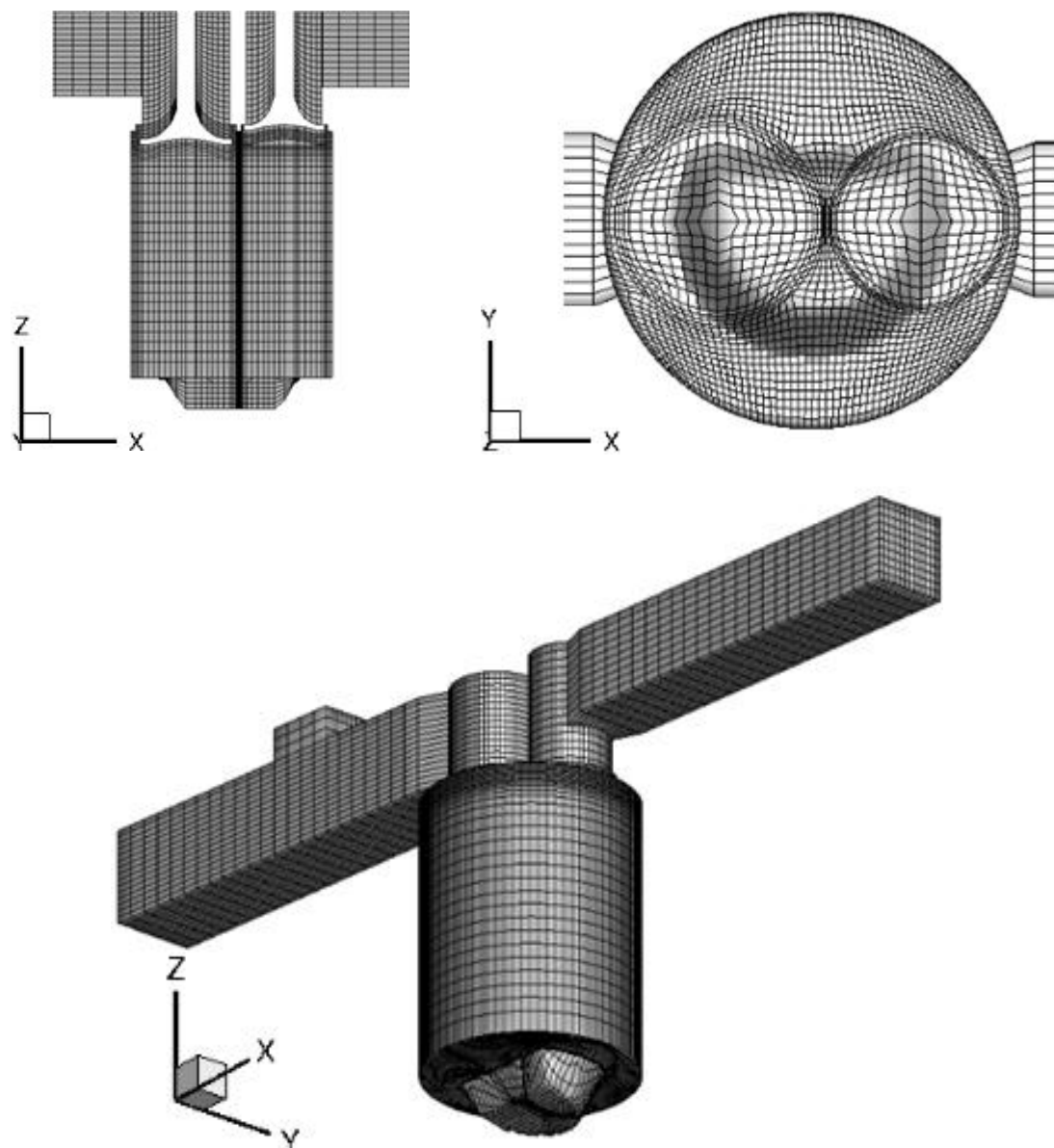


Figura 6. Malla seleccionada para simular el motor Lombardini LGW-523-MPI. Malla 5: 104132 celdas.

La velocidad más alta a la que se va a simular el motor en estudio es 4500 [RPM], por lo que para comprobar el estudio de convergencia se cambia únicamente en las variables de entrada la magnitud de la velocidad a 4500 [RPM], y se realizan simulaciones en frío con la malla seleccionada (malla 5) y con dos mallas más finas (malla 6 y malla 7). Después de obtener los resultados de dichas simulaciones se realiza un análisis de variaciones análogo al expuesto anteriormente. La tabla 5 muestra los resultados obtenidos.

Tabla 5. Variaciones obtenidas en la comprobación del estudio de convergencia a 4500 [RPM].

Malla	Variación relativa promedio [%]		
	TKE	SCL	Presión
6 (113210 celdas)	1,702	0,563	0,107
7 (172540 celdas)	1,438	0,782	0,192

Se observa que la presión presenta variaciones relativas promedio por debajo del 0,2 %, lo cual es un resultado esperado, y evidencia que sin importar la velocidad del motor, los resultados de la presión siguen siendo prácticamente independientes del tamaño de malla. Por otro lado la variación en la TKE sufre un incremento respecto a las simulaciones realizadas a 2500 [RPM], sin embargo también se observa que tanto para la malla 6 como para la malla 7 la variación sigue estando acotada entre 1 y 1,73 %.

Finalmente la SCL presenta un comportamiento inverso a la TKE, ya que en este caso las variaciones relativas promedio para las mallas 6 y 7, a 2500 [RPM] son más elevadas que a 4500 [RPM], lo que se traduce en una reducción de la variación con el aumento de la velocidad. En conclusión incrementar la velocidad de giro del motor conlleva un aumento en la variación de la TKE y una disminución en la variación de la SCL, sin embargo estos cambios no hacen necesario el uso de mallas más finas para la simulación del motor a 4500 [RPM], ya que las diferencias no sobrepasan los márgenes encontrados a partir de 104132 celdas (malla 5) para 2500 [RPM]. Es necesario aclarar que el estudio de convergencia de malla se realizó inicialmente evaluando únicamente las mallas 1, 2, 6, 7, 8 y 9, donde se observó que la variación en la TKE y la SCL convergía a partir de la malla 6, razón por la cual se decidió construir las mallas 3, 4 y 5, con el objetivo de encontrar una malla con menos elementos que la malla 6 pero que siguiera presentando comportamientos admisibles en las variaciones relativas calculadas, esto para disminuir lo más posible el costo computacional. Lo anterior explica por qué entre las mallas 2 a 5 se tienen regiones discretizadas con el mismo número de celdas.



## 4. Validación del modelo desarrollado

En esta sección se presenta el análisis realizado a los resultados experimentales reportados en [8], y a los resultados obtenidos con la simulación en KIVA del modelo desarrollado. Con base en los resultados y el análisis anterior se comparan los resultados computacionales con los experimentales. Este capítulo tiene por objetivo evidenciar las diferencias existentes entre lo desarrollado en este trabajo y lo ilustrado en [8]. Estas diferencias se cuantifican por medio del cálculo de errores para de esta manera tener una lectura confiable de la exactitud presente en los resultados obtenidos.

El proceso de validación se basa en el análisis de los resultados experimentales y computacionales obtenidos para los casos enlistados en la tabla 6. Los casos en los que el combustible es gasolina se usan como referencia para la comparación y el análisis, esto fundamentado en que el motor Lombardini LGW-523-MPI funciona típicamente con este combustible fósil. Es necesario aclarar que para todos los casos estudiados el motor opera al 100 [%] de carga y las demás condiciones y consideraciones tenidas en cuenta para el desarrollo de las simulaciones, coinciden con lo expuesto en el capítulo anterior.

Tabla 6. Casos de validación. Fuente: [8, 83].

Caso	Combustible	$\phi$ [-]	RPM	$T_{adm}$ [K]	$\dot{m}_{fuel}$ [kg/h]	$S_{CAD}$ [BTDC]
C1	Gas de síntesis	1	2500	300,84104	5,079748757	17,8
C2	Gasolina	1	2500	300,84104	2,204011	17,8
C3	Gas de síntesis	0,85	4500	298,81955	8,499607619	29
C4	Gasolina	1	4500	300,84104	4,141145	29

### 4.1 Verificación de la mezcla admitida

Como se explicó anteriormente, en el modelo desarrollado se busca que en el proceso de admisión entre a la cámara de combustión parte del combustible que se encuentra inicialmente en el depósito, y el aire necesario proveniente de la frontera situada en el ducto de admisión, todo esto para garantizar la relación de equivalencia y la masa de

mezcla deseadas, y así considerar con la mayor fidelidad posible el proceso de mezcla que se tiene en el motor real. Para lograr lo anterior, fue necesario realizar un proceso iterativo que se explica a continuación. Inicialmente, teniendo como entradas la composición del combustible, la relación de equivalencia y la masa molecular de cada uno de los componentes tanto del combustible como del comburente, se plantea la siguiente reacción estequiométrica global.

$$\sum_{i=1}^n x_i * Esp_i + k_{stq} * (0,21 * O_2 + 0,79 * N_2) \rightarrow a * CO_2 + b * H_2O + c * N_2 \quad (15)$$

Donde  $x_i$  es la fracción molar de la  $i$ ésima especie en el combustible,  $Esp_i$  es la  $i$ ésima especie en el combustible y  $k_{stq}$  es el coeficiente estequiométrico de la reacción. Entonces, balanceando por elementos la anterior reacción, y haciendo uso de las masas moleculares, es posible calcular la relación aire-combustible estequiométrica. De esta forma la relación aire-combustible real se define como sigue.

$$AF = \frac{AF_{stq}}{\phi} \quad (16)$$

Por otro lado, con base en las fracciones molares de la mezcla, es posible calcular la masa molecular y en consecuencia la constante de gas ideal de la misma, como sigue.

$$R_{mez} = \frac{Ru}{MW_{mez}} \quad (17)$$

Donde  $R_{mez}$  es la constante de gas ideal de la mezcla,  $Ru$  es la constante universal de los gases ideales y  $MW_{mez}$  es la masa molecular de la mezcla. Cabe anotar que este cálculo se replica análogamente para el combustible y el comburente, considerados individualmente. Como se explicó en el proceso de convergencia de malla, para garantizar la  $RC_{vol}$ , fue necesario ajustar la carrera del motor real, esto ocasionó un incremento en el volumen de la cámara de combustión aproximadamente del 33 [%], por lo que es necesario ajustar la masa de combustible real al modelo desarrollado. Considerando lo anterior, la masa de combustible y la masa de mezcla que debe tener la cámara de combustión al finalizar el proceso de admisión, se calculan como sigue.

$$m_{fuel} = \left( \frac{V_{CVAmalla}}{V_{CVAreal}} \right) * \frac{2 * \dot{m}_{fuel}}{60 * RPM * N_{cil}} \quad (18)$$

$$m_{mez} = (AF + 1) * m_{fuel} \quad (19)$$

Donde  $N_{cil}$  es el número de cilindros del motor, el motor Lombardini LGW-523-MPI tiene dos cilindros.  $V_{CVAreal}$  y  $V_{CVAmalla}$  son el volumen que tiene la cámara de combustión en el momento en que se cierra la válvula de admisión para el motor real y para el modelo desarrollado, respectivamente. Entonces  $V_{CVAreal}$  se calcula como sigue [39].

$$V_{CVAreal} = V_{PMSreal} + \left( \pi * \frac{bore^2}{4} \right) * (r + a_{real} - s_{CVAreal}) \quad (20)$$

Donde  $a_{real}$  es la longitud de la manivela, la cual es igual a la mitad de la carrera del motor real,  $V_{PMSreal}$  es el volumen en el PMS del motor real y  $s_{CVAreal}$  es la posición del pistón del motor real, en el momento en que se cierra la válvula de admisión. Después de calcular las masas de combustible y mezcla que se deben tener en la cámara de combustión al culminar el proceso de admisión, se procede a encontrar la presión de admisión y la presión inicial en el depósito de combustible, que permitan una alimentación satisfactoria del motor. Como es de esperar, no es posible garantizar que en la admisión entre a la cámara exactamente los valores de masa encontrados anteriormente, por esta razón nuevamente se toma como criterio que las iteraciones presentadas a continuación terminen cuando la masa de mezcla admitida y la relación de equivalencia global en la cámara de combustión tengan un error respecto a los valores esperados, menor al error relativo máximo que KIVA permite en la solución implícita de la difusión de masa (este error tiene un valor del 0,1 %) [46, 47, 49, 50].

La presión de admisión es la presión inicial en las simulaciones realizadas, para todo el dominio computacional exceptuando el depósito de combustible. Para calcular esta presión es necesario situarse en el primer punto muerto inferior (PMI), 180 [CAD] después de que inicia la simulación, en medio del proceso de admisión, esto con el objetivo de tener valores de referencia confiables para los cálculos. La presión de admisión se calcula por la ley de gases ideales, sin embargo, debido a diferentes procesos que ocurren durante la simulación es necesario hacer uso de dos factores correctivos que se explican a continuación.

En el motor Lombardini LGW-523-MPI, como en la mayoría de motores, la válvula de admisión continua abierta después del primer PMI, y a partir de este punto debido al movimiento del pistón, parte de la masa que ya fue admitida a la cámara de combustión se devuelve al puerto y el ducto de admisión, hasta que la válvula se cierre. Por esta razón el siguiente factor correctivo para el cálculo de la presión de admisión, busca que la masa

de mezcla deseada se encuentre en la cámara al culminar el proceso de admisión, y no 180 [CAD] después de iniciar la simulación.

$$fm_{mez} = \frac{m_{180mez}}{m_{CVAmez}} \quad (21)$$

Donde  $fm_{mez}$  es el factor de corrección de masa de mezcla en la iteración actual,  $m_{180mez}$  es la masa que hay en la cámara de combustión en el primer PMI alcanzado en la simulación de la iteración anterior y  $m_{CVAmez}$  es la masa que hay en la cámara de combustión cuando se cierra la válvula de admisión en la simulación de la iteración anterior. Por otro lado, la presión inicial en la cámara de combustión sufre un leve incremento cuando alcanza el primer PMI, ya que el valor a calcular es la presión de admisión, este cambio debe tenerse en cuenta, esto se logra utilizando el siguiente factor.

$$fP = \frac{P_{ant}}{P_{180}} \quad (22)$$

Donde  $fP$  es el factor de corrección de presión en la iteración actual,  $P_{180}$  es la presión que tiene la cámara de combustión en el primer PMI alcanzado en la simulación de la iteración anterior y  $P_{ant}$  es la presión de admisión utilizada para la simulación de la iteración anterior. De esta forma, la presión de admisión para la iteración actual se calcula como sigue.

$$P_{adm} = fP * \left( \frac{(fm_{mez} * m_{mez}) * R_{mez} * T_{180}}{V_{180}} \right) \quad (23)$$

Donde  $T_{180}$  es la temperatura que tiene la cámara de combustión en el primer punto muerto inferior alcanzado en la simulación de la iteración anterior y  $V_{180}$  es el volumen de la cámara de combustión en el primer punto muerto inferior. Por su parte el cálculo de la presión inicial en el depósito de combustible, también necesita un factor de corrección, que busca cuantificar que fracción de la masa de combustible que se tiene inicialmente, entra y permanece en la cámara de combustión después de que se cierra la válvula de admisión.

$$fm_{fuel} = \frac{m_{fueli}}{m_{CVAfuel}} \quad (24)$$

Donde  $fm_{fuel}$  es el factor de corrección de masa de combustible en la iteración actual,  $m_{fueli}$  es la masa de combustible que tiene inicialmente el depósito en la simulación de la iteración anterior y  $m_{CVAfuel}$  es la masa de combustible que hay en la cámara de combustión cuando se cierra la válvula de admisión en la simulación de la iteración

anterior. Así, la presión inicial en el depósito de combustible ( $P_{dep}$ ) para la iteración actual se calcula como sigue.

$$P_{dep} = \frac{(f m_{fuel} * m_{fuel}) * R_{fuel} * T_{adm}}{V_{dep}} \quad (25)$$

Donde  $R_{fuel}$  es la constante de gas ideal del combustible y  $V_{dep}$  es el volumen del depósito de combustible. Finalmente cabe resaltar que las simulaciones llevadas a cabo para el anterior proceso iterativo, fueron realizadas en frío, corriendo únicamente hasta el cierre de la válvula de admisión, con el objetivo de reducir el costo computacional sin afectar la confiabilidad de los resultados.

En la tabla 7 se muestran las presiones de admisión y en el depósito obtenidas para cada uno de los casos estudiados, con estas presiones como se observa, se logra garantizar la admisión de la mezcla acorde con los datos experimentales, dentro del margen de error permitido.

Tabla 7. Verificación de la mezcla admitida para cada caso de validación.

Caso	$P_{adm}$ [kPa]	$P_{dep}$ [kPa]	$m_{mez}$ ecuación (19) [g]	$m_{mez}$ modelo [g]	Error $m_{mez}$ [%]	$\phi$ tabla 6 [-]	$\phi$ modelo [-]	Error $\phi$ [%]
C1	69,2304	839,1869	0,2576	0,2578	0,0666	1,0000	0,9993	0,0655
C2	76,3370	92,8738	0,3099	0,3100	0,0061	1,0000	0,9999	0,0076
C3	70,4712	780,2181	0,2744	0,2744	0,0173	0,8500	0,8499	0,0080
C4	76,8415	94,7600	0,3235	0,3235	0,0158	1,0000	1,0001	0,0143

## 4.2 Mecanismos de reacción y chispa

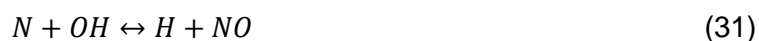
Como se observa en el anexo A.3, con base en la literatura y el estudio realizado, el mecanismo de reacciones elementales más apto para la simulación de la combustión de gases de síntesis es el GRI 3.0 [7, 63, 64, 66]. No obstante, el uso de química detallada o semidetallada implica un incremento significativo en el costo computacional [17].

De forma más específica, para el modelo desarrollado, con la malla resultante del estudio de convergencia, y para la simulación de un ciclo completo del motor Lombardini LGW-523-MPI, usando el mecanismo GRI 3.0, el tiempo de cómputo es aproximadamente 10 días. Por otro lado, para el mismo caso pero usando cinética global, dicho tiempo es

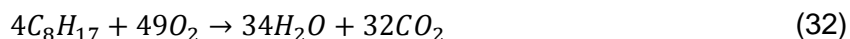
aproximadamente 1 día. Debido a esto, y teniendo en cuenta el elevado número de simulaciones necesarias para el desarrollo de esta investigación, tanto en la validación como en el proceso de optimización, el uso del mecanismo GRI 3.0 es una práctica inviable con la capacidad computacional disponible para este trabajo. Por esta razón se plantea el uso de mecanismos globales, buscando modelar con la mayor fidelidad posible la cinética de reacción característica del caso de estudio.

El mecanismo de reacción para la combustión del gas de síntesis está constituido por 6 reacciones y 12 especies. La primera reacción representa la oxidación global del  $CH_4$  y fue obtenida del libro de Turns [35]. La segunda reacción modela la oxidación global del  $H_2$  y se consiguió de un estudio centrado en la simulación numérica de la combustión de esta especie [74]. La tercera reacción compete a la oxidación del  $CO$  para producir  $CO_2$  y fue adquirida del mecanismo BFER que se encuentra en el estudio referenciado en [73].

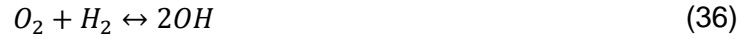
Finalmente, las últimas tres reacciones corresponden al mecanismo extendido de Zeldovich, utilizado para modelar la formación de  $NO$  por altas temperaturas, y se obtuvieron del libro de Heywood [38].



El mecanismo de reacción se mantiene constante siempre y cuando el combustible sea el gas de síntesis en estudio. Entonces, para modelar la cinética de combustión del motor alimentado con gasolina las reacciones (26) y (27) se eliminan, y se introduce una nueva reacción que representa la oxidación global de este hidrocarburo, el cual es representado en KIVA con la molécula  $C_8H_{17}$ . Esta reacción se adquirió del libro de Heywood y es la siguiente [38].



El modelo químico se completa con la adición de 6 reacciones de equilibrio importantes para la oxidación de hidrocarburos y formación de  $NO_x$  en motores [46, 49]. Estas reacciones se obtuvieron de los manuales de KIVA y se presentan a continuación [46, 49].



Es posible observar que las reacciones de equilibrio contribuyen a la generación de radicales libres, necesarios para la formación de NO por el mecanismo de Zeldovich. En congruencia con las reacciones cinéticas, la contribución de las reacciones de equilibrio a los términos fuente  $\dot{\rho}_m^c$  y  $\dot{Q}^c$  se calculan con las ecuaciones (60) y (62) (ver anexo A.1), respectivamente [46]. Por su parte la tasa de reacción  $\omega_r$  se calcula de forma diferente, esta es determinada implícitamente por la siguiente condición de restricción [46].

$$\prod_m \left( \frac{\rho_m}{W_m} \right)^{b_{mr} - a_{mr}} = K_c^r(T) \quad (39)$$

Donde  $K_c^r(T)$  es la constante de equilibrio de la reacción “r”, y en KIVA es calculada con base en la temperatura como se muestra a continuación [46].

$$K_c^r(T) = \exp \left( A \ln \left( \frac{T}{1000} \right) + B \left( \frac{1000}{T} \right) + C + D \left( \frac{T}{1000} \right) + E \left( \frac{T}{1000} \right)^2 \right) \quad (40)$$

Donde A, B, C, D y E son constantes, y se muestran en la tabla 8 para las reacciones utilizadas.

Tabla 8. Constantes para el cálculo de la constante de equilibrio. Fuente: [46, 49].

Reacción	A	B	C	D	E
(33)	0,990207	-51,7916	0,993074	-0,343428	0,0111668
(34)	0,431310	-59,6554	3,503350	-0,340016	0,0158715
(35)	0,794709	-113,208	3,168370	-0,443814	0,0269699
(36)	-0,652939	-9,82320	3,930330	0,163490	-0,0142865
(37)	1,158882	-76,8472	8,532155	-0,868320	0,0463471
(38)	0,980875	68,4453	-10,5938	0,574260	-0,041457

Entonces, el proceso de validación consiste en el ajuste del coeficiente pre-exponencial ( $A_r$ ) y de la temperatura de activación ( $T_r$ ) presentes en el modelo de Arrhenius para el cálculo de la tasa de las reacciones cinéticas en la ecuación (61) como muestra el anexo A.1 [90]. Por otro lado, también se ajusta la energía que suministra la chispa y la duración de la misma. Estos ajustes se hacen buscando que la presión máxima en la cámara de

combustión resultante de las simulaciones, sea lo más cercana posible, en magnitud y ubicación temporal, a la obtenida en las pruebas experimentales realizadas en [8].

El coeficiente  $A_r$  y la temperatura  $T_r$  se ajustan únicamente para las reacciones globales de oxidación (26), (27), (28) y (32). Para el mecanismo extendido de Zeldovich, reacciones (29), (30) y (31), se mantienen las mismas constantes reportadas en el libro de Heywood [38]. Esto con el objetivo de no alterar la tasa de formación de NO, y así tener una lectura confiable de las emisiones de este contaminante. Con base en esto, la tabla 9 presenta las constantes de Arrhenius definitivas, para el cálculo de la tasa a la que se da cada una de las reacciones del mecanismo cinético. Además de  $A_r$  y  $T_r$  también se presentan los órdenes de reacción y el exponente de la temperatura. Como se vio anteriormente, las únicas reacciones bidireccionales son las del mecanismo extendido de Zeldovich, por esta razón en la tabla 9 presentan valores en las constantes de Arrhenius para la reacción hacia adelante y hacia atrás.

El modelo de encendido provocado que dispone KIVA permite la especificación del volumen, ubicación, momento de inicio, duración y energía de la chispa [44, 46, 47 y 49]. Como se mostró en la sección 3.1, basados en el análisis de imagen se definió la ubicación y el volumen (0,25 [cm<sup>3</sup>]) de la chispa. Por su parte, el momento en el que se salta la chispa ( $S_{CAD}$ ) está definido en la tabla 6 para cada uno de los casos de validación. Entonces, los únicos parámetros desconocidos y por esta razón ajustables, son la energía y la duración de la chispa.

En KIVA la energía suministrada por la chispa viene dada por la variable de entrada “xignit”, la cual es un multiplicador de energía y tiene unidades de frecuencia [1/seg] [46, 47]. De esta forma el modelo de encendido provocado consiste en lo siguiente: en las celdas que tienen su centro dentro del volumen definido para la chispa, la energía interna sufre un incremento en “xignit” veces por cada segundo que transcurra con la chispa activa, hasta que la temperatura de la celda alcance un valor máximo definido internamente [46, 47, 89].

Finalmente cabe resaltar que en los MCI-SI las condiciones, especificaciones y parámetros de la chispa, generalmente dependen únicamente de la velocidad de giro del motor [39, 40]. Con base en esto, el ajuste se hace considerando que la duración de la chispa y “xignit” se mantengan constantes para los casos en los que la velocidad de giro es la misma. En la tabla 6 se observa que únicamente se trabajan dos velocidades de giro, a continuación



se presentan los parámetros de chispa para cada una de ellas. Para 2500 [RPM]  $x_{ignit} = 2600$  [1/seg] y la chispa tiene una duración de 22,5 [CAD]. En el caso de tener una velocidad de 4500 [RPM] la chispa dura 40,5 [CAD] con  $x_{ignit} = 4223,6$  [1/seg].

Tabla 9. Constantes de Arrhenius para el mecanismo cinético. Unidades: [mol], [seg], [cm<sup>3</sup>] y [K]. Fuente: [35, 38, 73, 74].

Reacción	Sentido	A <sub>r</sub>	T <sub>r</sub>	Exp. Temp.	Ordenes de reacción	
(26)	Adelante	1,30E+08	25358	0	CH <sub>4</sub>	O <sub>2</sub>
					-0,3	1,3
(27)	Adelante	2,00E+10	24754	0	H <sub>2</sub>	O <sub>2</sub>
					1	0,5
(28)	Adelante	2,00E+08	15345	0,8	CO <sub>2</sub>	O <sub>2</sub>
					1	0,5
(29)	Adelante	7,60E+13	38000	0	N <sub>2</sub>	O
					1	1
	Atrás	1,60E+13	0	0	N	NO
					1	1
(30)	Adelante	6,40E+09	3150	1	O <sub>2</sub>	N
					1	1
	Atrás	1,50E+09	19500	1	O	NO
					1	1
(31)	Adelante	4,10E+13	0	0	N	OH
					1	1
	Atrás	2,00E+14	23650	0	H	NO
					1	1
(32)	Adelante	1,00E+10	13965	0	C <sub>8</sub> H <sub>17</sub>	O <sub>2</sub>
					0,25	1,5

### 4.3 Resultados y análisis

Después de definir todos los parámetros necesarios, con base en las consideraciones teóricas y experimentales presentadas anteriormente, se procede con la simulación de cada uno de los casos de validación. En el anexo C se presenta el archivo de entrada para KIVA "itape5", que contiene las condiciones de simulación para cada uno de los casos enlistados en la tabla 6. Por otro lado el anexo F presenta a modo de ejemplo para el caso de validación C3 los contornos de temperatura en el cilindro del motor. A partir de esta información es posible evidenciar la chispa y la propagación que presenta la llama en la cámara, durante todo el proceso de combustión.

Con los mecanismos cinéticos y la chispa, ajustados y presentados en la sección anterior, se obtuvieron diferencias en la presión máxima respecto a los resultados obtenidos en [8]. La tabla 10 muestra los valores computacionales y experimentales, para la magnitud y ubicación temporal del parámetro en cuestión, además de los errores relativos de los resultados obtenidos con KIVA respecto a los reportados en [8]. Cabe resaltar que para el caso C4 no se dispone de la curva de presión experimental en la cámara de combustión, por esta razón, para este caso se presentan únicamente los resultados computacionales.

Tabla 10. Comparación para cada caso de validación de la magnitud y ubicación temporal de la  $P_{\max}$ . Fuente de resultados experimentales: [8, 83].

Caso	Computacional $P_{\max}$ [kPa]	Experimental $P_{\max}$ [kPa]	Error $P_{\max}$ [%]	Ángulo de $P_{\max}$ computacional [CAD]	Ángulo de $P_{\max}$ experimental [CAD]	Error ang. $P_{\max}$ [%]
C1	4428,9200	4427,1691	0,0395	372,6070	372,0000	0,1632
C2	4111,6700	4114,9518	0,0798	374,7890	380,0000	1,3713
C3	4524,6400	4525,0192	0,0084	370,0230	372,0000	0,5315
C4	4924,2900	-	-	371,8320	-	-

Para la validación del caso C1 se tuvo la libertad de ajustar las constantes para las reacciones (26), (27) y (28) además de los parámetros de chispa a 2500 [RPM]. Por su parte para el caso C2 se ajustaron únicamente las constantes de la reacción (32), coincidiendo con el caso C1 en los parámetros de chispa y las constantes de las reacciones adicionales (28), (29), (30) y (31). En la validación del caso C3 se utilizó el mismo mecanismo que en el caso C1 y solo se modificaron los parámetros de chispa para 4500 [RPM]. Finalmente el caso C4 se simuló con la misma chispa del caso C3 y el mismo mecanismo del caso C2, y no se realizaron ajustes adicionales.

Esto explica porque para el caso C1 se presentan las menores diferencias entre los resultados reportados en [8] y los obtenidos con el modelo desarrollado, para la magnitud y la ubicación temporal de la  $P_{\max}$ . Este procedimiento tuvo por objetivo realizar un proceso de validación realista, donde el mecanismo de reacción se mantenga constante si el combustible a quemar es el mismo, y los parámetros de la chispa cambien solo si la velocidad de giro del motor también lo hace.

De esta forma, la figura 7 presenta la evolución temporal de la presión, el calor liberado (HR) acumulado y la fracción de masa quemada ( $X_b$ ) en la cámara de combustión; además de la curva presión-volumen. Se muestran los resultados experimentales y

computacionales para cada uno de los casos de validación. Para calcular la  $X_b$  y el HR acumulado se parte de la curva de presión-volumen, razón por la cual para el caso C4 únicamente se presentan los resultados obtenidos con KIVA. La forma en que se calculan estos parámetros se puede consultar en el anexo D.

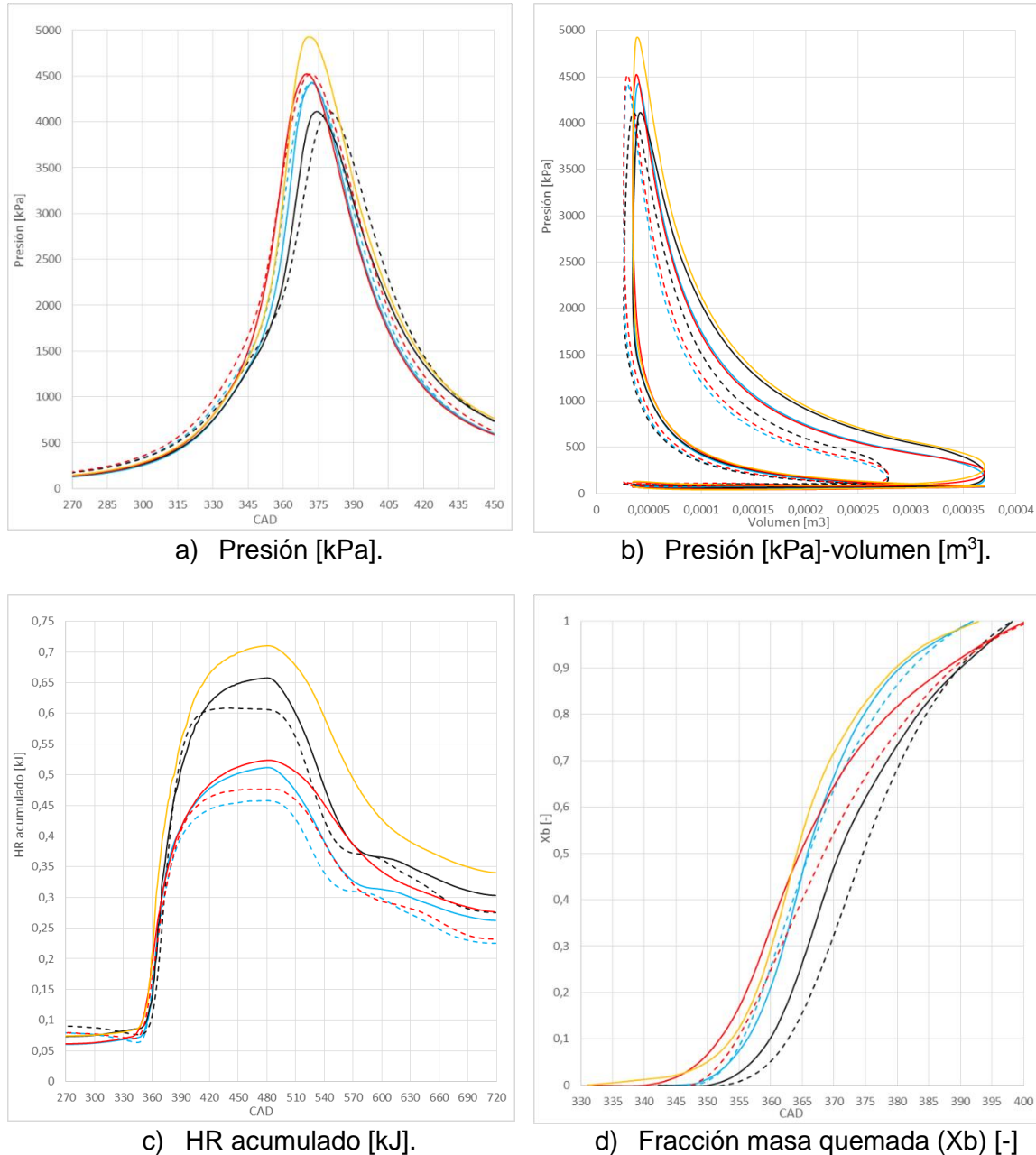
En la figura 7-a se observa que las  $P_{max}$  reportadas en [8] son mayores y se dan más rápido cuando el motor es alimentado con el gas de síntesis respecto a cuándo es alimentado con gasolina, esto conlleva problemas, debido a que el motor se diseñó para su operación con gasolina y para las presiones alcanzadas con este combustible [91, 92]. En los resultados provenientes de KIVA se tiene un comportamiento análogo a 2500 [RPM], no obstante, a 4500 [RPM] el caso C4 es el que presenta las mayores presiones dentro del cilindro. También es posible observar que para todos los casos, antes de 350 [CAD] y después del punto de máxima presión, los resultados experimentales presentan mayores valores de presión respecto a los computacionales, esto se debe por el ajuste realizado a los valores de la presión de admisión para garantizar la masa de mezcla admitida al motor. Como se vio en la sección 4.1, este ajuste causa que las presiones iniciales en KIVA sean menores a las de las pruebas realizadas en [8] a causa de la diferencia en el volumen de la cámara de combustión.

La figura 7-b evidencia las mayores discrepancias existentes entre los resultados experimentales y computacionales, debidas a la diferencia de la carrera del motor, la cual al ser mayor causa que el volumen en la cámara también lo sea para las simulaciones realizadas con el modelo desarrollado. Esto conlleva a que el área de trabajo útil sea considerablemente más grande para el modelo, respecto al motor real, y es la razón por la cual en el cálculo de algunos parámetros del motor es necesario realizar una corrección en función del volumen de desplazamiento real y del modelo desarrollado, según se muestra en el anexo D.

Por otro lado, se observa que el comportamiento de la presión respecto al volumen, en la mayor parte de las carreras de compresión y expansión, es similar tanto experimental como computacionalmente, para los casos en los que el combustible es el mismo sin importar la relación de equivalencia o la velocidad del motor.

Aunque el motor alimentado con gas de síntesis presenta una mayor presión máxima, cuando el suministro de combustible es gasolina la presión en la carrera de expansión es mayor, mientras que en la carrera de compresión el valor de la presión tiene gran parecido

para todos los casos estudiados. Esto ocasiona que el área de trabajo útil sea mayor para la gasolina en comparación con el gas de síntesis, y expone que el impacto que tiene la ubicación temporal de la máxima presión es en ocasiones más importante que el que acarrea la magnitud de la misma.



--- C1 Experimental    — C1 Computacional    --- C2 Experimental    — C2 Computacional  
 --- C3 Experimental    — C3 Computacional    — C4 Computacional

Figura 7. Resultados experimentales y computacionales para cada uno de los casos de validación. Fuente de resultados experimentales: [8, 83].

La evolución temporal del HR acumulado se muestra en la figura 7-c. Para todos los casos se observa un fuerte incremento en este parámetro, entre 330 y 390 [CAD]. Esto es a causa de que en dicho rango temporal se inicia la combustión y ocurre la mayor liberación de energía por parte de las reacciones químicas. Después, entre 390 y 480 [CAD] aproximadamente, el HR acumulado sigue creciendo pero a menor escala, ya que la combustión está terminando, la liberación de energía es mucho menor, y las válvulas continúan cerradas. A partir de 480 [CAD], el HR acumulado decrece hasta terminar el ciclo del motor, esto es causado principalmente por la energía que se llevan los gases de la cámara de combustión en el momento en que se abre la válvula y da comienzo el proceso de escape.

Por otro lado, aunque se tiene un comportamiento muy similar, es posible notar que para todos los casos, después de aproximadamente 390 [CAD], el HR acumulado es mayor en las simulaciones realizadas que en los resultados reportados en [8]. Esto se debe a que en el modelo desarrollado se tiene más masa de mezcla, ocasionando mayor liberación de energía por parte de las reacciones químicas. Para corroborar esto se puede visitar el anexo D donde se observa que en el cálculo del HR el volumen tiene una influencia doble, que como se dijo anteriormente, representa la mayor discrepancia entre el motor real y el modelo desarrollado.

La fracción de masa quemada clarifica la velocidad a la que se da la combustión. Esta variable se divide en tres secciones, del 0-10 [%], del 10-90 [%] y del 90-100 [%] de la masa quemada [38]. Las dos primeras zonas son las más representativas, ya que el último 10 [%] de la masa quemada puede demorarse bastante en hacer combustión, respecto al 90 [%] inicial [38]. La figura 7-d evidencia su comportamiento respecto al ángulo del cigüeñal. A 2500 [RPM] se observa que tanto experimental como computacionalmente el gas de síntesis se quema más rápido que la gasolina, esto es causado por el contenido de hidrogeno en el combustible, el cual ocasiona mayores velocidades de llama, llevando a que esta se propague en menor tiempo y acelerando así la combustión [93].

Por otro lado, teniendo en cuenta la velocidad de giro del motor, el caso C4 es el que a 4500 [RPM] muestra una combustión más rápida. Lo anterior se debe principalmente a la diferencia que existe en las relaciones de equivalencia, ya que en el caso C3 se tiene una mezcla pobre con  $\phi=0,85$  y el caso C4 presenta una mezcla estequiométrica, lo que acompañado de un mayor LHV para la gasolina ocasiona presiones más elevadas en la

cámara de combustión, que como se ve en el anexo D es el principal indicador para el cálculo de la fracción de masa quemada. Sin embargo, observando el comportamiento del caso C2, se puede deducir que probablemente el caso C4 experimental tiene presiones más bajas y más tardías que su homólogo computacional, ya que su combustión debería ser más lenta que la combustión del gas de síntesis, de forma similar al comportamiento enunciado para 2500 [RPM] [93].

También es posible notar que en todo el dominio, los resultados provenientes de KIVA evidencian una combustión más rápida que los ilustrados en [8], con la excepción del caso C1 donde el 50 [%] de la masa quemada se alcanza más rápido experimentalmente. Esto se debe nuevamente a que la presión en el punto en que inicia la combustión, es menor para el modelo desarrollado, respecto a las pruebas realizadas en [8]. Como se ve en el anexo D, este valor tienen gran influencia en el cálculo de la  $X_b$  y su menor magnitud ocasiona que en el modelo las moléculas se encuentren más separadas facilitando la propagación rápida de la llama y aumentando la velocidad de la combustión.

Para tener un análisis más profundo en la validación del modelo desarrollado, se estudiaron algunos parámetros indicados y operativos del motor, además de sus principales emisiones contaminantes. En la tabla 11 se exponen los valores experimentales y computacionales de la PI, la IMEP, el ISFC, la eficiencia térmica indicada y las emisiones de NO, CO y CO<sub>2</sub>.

Tabla 11. Valores experimentales y computacionales de los parámetros indicados del motor y sus emisiones contaminantes, para cada uno de los casos de validación. Fuente de resultados experimentales: [8, 83, 91, 92].

Caso	Calculo WI	PI [kW]	IMEP [kPa]	ISFC [g/kW-h]	Ef. Term. Ind. [%]	Emisión NO [g]	Emisión CO [g]	Emisión CO <sub>2</sub> [g]
C1 exp.	Curva P-V	4,23	804,70	600,17	36,30	1,29E-03	3,82E-03	7,24E-02
C2 exp.	Curva P-V	5,24	997,29	210,12	38,94	1,19E-03	4,31E-03	5,79E-02
	Curva Fabrica	5,25	997,65	210,04	38,95	1,19E-03	4,31E-03	5,79E-02
	Error [%]	0,04	0,04	0,04	0,04	0,00	0,00	0,00
C3 exp.	Curva P-V	7,78	822,01	546,15	39,89	1,03E-03	2,17E-04	6,56E-02
C4 exp.	Curva Fabrica	9,72	1026,35	213,12	38,39	1,24E-03	4,91E-03	6,01E-02
C1 comp.	Curva P-V	4,48	851,00	567,65	38,38	1,25E-03	1,61E-03	6,39E-02
C2 comp.	Curva P-V	5,19	986,32	212,45	38,51	1,03E-03	1,33E-03	5,82E-02
C3 comp.	Curva P-V	7,35	775,97	578,71	37,64	9,29E-04	8,74E-05	6,16E-02
C4 comp.	Curva P-V	9,63	1017,10	215,04	38,05	1,12E-03	1,86E-03	6,02E-02

Como muestra el anexo D, la forma común de calcular los parámetros indicados de un MCI es partiendo de la curva presión-volumen (P-V) en la cámara de combustión. Por otro lado, a causa de que el caso C4 experimental no dispone de dicha curva y junto con el caso C2 son casos de referencia para los cuales el motor opera bajo las condiciones de fábrica, se desarrolla una nueva metodología de cálculo basada en las curvas de potencia-RPM de fábrica [91, 92]. Con el objeto de corroborar la fiabilidad de dicha metodología, el caso C2 se evalúa a partir de la curva P-V y de las curvas de fábrica.

De esta forma, la tabla 11 presenta la forma en que se calculó el trabajo indicado (WI) para cada caso, y el error relativo obtenido entre ambos métodos para el caso C2. Por otro lado, la lectura de las EmC obtenidas de los casos simulados en KIVA, se realiza en la cámara de combustión justo antes de empezar el proceso de escape, para así tener una lectura confiable y completa de la composición de los gases de escape.

La tabla 11 muestra que los errores en el caso C2 de los parámetros indicados del motor calculados con base en las curvas de fábrica, respecto a los obtenidos a partir de la curva P-V, tienen un valor aproximado de 0,04 [%]. Esto evidencia la alta proximidad que tienen ambos métodos de cálculo, lo que destaca la confiabilidad que tiene la metodología desarrollada para calcular los parámetros del caso C4 experimental.

Es posible observar que para los casos C2, C3 y C4 la IMEP es mayor en los resultados reportados en [8] respecto a los obtenidos con KIVA, esto ocasiona que la PI y la eficiencia térmica indicada también sean mayores experimentalmente, mientras el ISFC es más alto para las simulaciones de los casos en cuestión. Para el caso C1, los parámetros indicados del motor tienen un comportamiento inverso al discutido anteriormente, esto se debe a que en esta ocasión la IMEP resultante de la simulación realizada es mayor a la obtenida en [8]. Este comportamiento es causado por que en el caso C1, como se vio anteriormente, el ángulo del cigüeñal en el que se da la máxima presión computacional es el más cercano a su par experimental. En los demás casos, la  $P_{max}$  simulada se presenta en un punto más cercano al PMS, que la obtenida en [8]. Esto último manifiesta que en el modelo desarrollado los gases de combustión transfieren una menor cantidad de trabajo al pistón en la carrera de expansión [38, 39, 40].

Por otro lado, las emisiones de CO y NO siempre son menores para todos los casos simulados con el modelo desarrollado, respecto a las pruebas realizadas en [8]. La emisión de CO<sub>2</sub> cumple la regla anterior, exceptuando en los casos donde se quema gasolina, ya

que para C2 y C4 las emisiones de  $\text{CO}_2$  son más altas computacionalmente. Esto se debe a que en el modelo cinético utilizado, el CO solo puede destruirse y no se tienen reacciones de formación, el NO aparece como producto y reactante en algunas reacciones, y el  $\text{CO}_2$  únicamente se forma en las oxidaciones globales, sin tener la posibilidad de disociarse [38, 73]. Para cuantificar las diferencias entre lo simulado y lo presentado en [8], se realiza un cálculo de errores relativos, tomando como referencia los resultados experimentales. La tabla 12 presenta dichos errores, para cada uno de los casos de validación, y para los parámetros indicados y las emisiones del motor Lombardini LGW-523-MPI. Es posible notar que en los parámetros indicados del motor, cuando este es alimentado con el gas de síntesis, el modelo desarrollado presenta errores entre 5,4 [%] y 6 [%] respecto a los resultados experimentales. Por su parte, cuando el combustible de suministro es gasolina, dichos errores son menores al 1,2 [%]. Estas diferencias son causadas principalmente por las disparidades en la evolución temporal de la presión, y la magnitud y ubicación temporal de la  $P_{\text{max}}$  entre lo reportado en [8] y lo simulado en KIVA. Para la gasolina los errores son menores, ya que como se vio anteriormente, las discrepancias de la presión en la carrera de expansión, tienden a compensarse con las homologas en la carrera de compresión.

Tabla 12. Errores relativos en cada caso de validación, de los resultados computacionales respecto a los experimentales.

Caso	PI [%]	IMEP [%]	ISFC [%]	Ef. Term. Ind. [%]	Emisión NO [%]	Emisión CO [%]	Emisión $\text{CO}_2$ [%]
C1	5,75522	5,75402	5,41881	5,7292	2,75612	57,8672	11,6969
C2	1,09949	1,09988	1,11172	1,099494	13,7638	69,2352	0,55607
C3	5,60127	5,60167	5,96201	5,62661	10,0875	59,6994	6,07003
C4	0,90529	0,90097	0,90096	0,892917	9,77306	62,14	0,15509

Se observa que las emisiones de NO presentan errores acotados entre 2 y 14 [%], sin evidenciar un comportamiento particular en función de las RPM del motor o la composición del combustible. El CO emitido resalta las mayores disparidades entre lo experimental y lo computacional, ya que sus errores están por encima del 57 [%], siendo de menor magnitud para el gas de síntesis respecto a la gasolina. Por su parte, el  $\text{CO}_2$  es globalmente la emisión con mejor exactitud en la predicción del modelo desarrollado, ya que su error siempre es menor al 12 [%], y en el caso de quemar gasolina están por debajo del 0,6 [%]. Según se explicó, los casos C2 y C4 son utilizados como referencia ya que operan con el combustible y bajo las condiciones de fábrica establecidas para el motor Lombardini LGW-523-MPI [8, 91, 92]. Con base en esto a continuación se realiza un análisis que busca



evidenciar las diferencias existentes cuando el motor es operado con gas de síntesis, respecto a los casos de referencia a las mismas RPM. De esta forma, la tabla 13 muestra las comparaciones porcentuales que tiene el caso C1 respecto al caso C2, y las que tiene el caso C3 respecto al caso C4. Esto se ilustra para los casos simulados en KIVA y los resultantes de las pruebas realizadas en [8]. Posteriormente, la tabla 13 expone las diferencias absolutas entre las comparaciones experimentales y las computacionales.

Tabla 13. Comparaciones experimentales y computacionales respecto a los casos de referencia C2 y C4.

Caso	PI	IMEP	ISFC	Ef. Term. Ind.	Emisión NO	Emisión CO	Emisión CO <sub>2</sub>
<b>Comparaciones entre casos experimentales [%]</b>							
C1 vs C2	-19,311	-19,311	185,637	-6,78273	7,86235	-11,405	25,0276
C3 vs C4	-19,909	-19,909	156,269	3,900082	-16,648	-95,582	9,17739
<b>Comparaciones entre casos computacionales [%]</b>							
C1 vs C2	-13,719	-13,719	167,189	-0,34645	21,6305	21,3321	9,7927
C3 vs C4	-23,705	-23,708	169,123	-1,06254	-16,939	-95,297	2,39149
<b>Diferencia entre las comparaciones experimentales y las computacionales [%]</b>							
C1 vs C2	5,59248	5,59184	18,4485	6,436288	13,7681	32,7369	15,2349
C3 vs C4	3,79541	3,79907	12,8541	4,962624	0,2905	0,28483	6,7859

Se observa que para los dos casos de comparación, tanto computacional como experimentalmente, el gas de síntesis presenta menores valores de PI, IMEP respecto al uso de gasolina, caso contrario para el ISFC el cual es mayor. Para la eficiencia térmica indicada exceptuando el caso C3 vs C4 experimental, la gasolina siempre presenta mayor eficiencia que el gas de síntesis. En el caso de la emisión de CO<sub>2</sub>, siempre se tienen mayores valores para el gas de síntesis respecto a la respectiva configuración de referencia. La gasolina, por su parte, presenta mayores emisiones de NO a 4500 [RPM] y menores a 2500 [RPM] respecto al gas de síntesis. La emisión de CO siempre es menor para el gas de síntesis cuando el motor opera a 4500 [RPM], sin embargo a 2500 [RPM] se evidencia una diferencia en signo entre las comparaciones predichas en KIVA y lo reportado en [8], ya que a la velocidad en cuestión, computacionalmente las emisiones de CO son mayores para el gas de síntesis y experimentalmente lo son para el caso de referencia C2.

Al detallar los errores absolutos entre las comparaciones del modelo desarrollado y las experimentales, se observa que para los parámetros indicados del motor, a 2500 [RPM]

las discrepancias se acotan entre 5,5 y 18,5 [%], mientras que a 4500 [RPM] están entre 3,7 y 12,9 [%]. En el caso C1 vs C2 las diferencias computacionales son menores a las experimentales, lo que indica que las predicciones para el gas de síntesis a 2500 [RPM] pueden estar sobreestimadas, respecto a la operación convencional del motor. Caso contrario en la comparación C3 vs C4, por lo que a 4500 [RPM] los resultados en los parámetros indicados del motor estarán subestimados. Por otro lado, para todas las emisiones contaminantes dichas diferencias son menores al 6,8 [%] a 4500 [RPM], entretanto que a 2500 [RPM] siempre superan el 13 [%]. Todo esto destaca que la exactitud que se tiene a 4500 [RPM] es mayor a la ostentada 2500 [RPM], para la comparación con los casos de referencia.

Finalizando, al tener todos los casos validados, se observa que existen diferencias entre las predicciones realizadas en este trabajo y lo reportado en [8]. Como se pudo detallar las mayores disparidades se presentan en la lectura de EmC, esto se debe principalmente al uso de cinética global, a la modificación de algunas de las constantes de reacción y a la zona y el momento en que se midieron las emisiones en las simulaciones. Por su parte, los parámetros indicados del motor presentan errores debidos a diferentes razones, destacando la diferencia de tamaño entre el motor simulado y el real, además de los ajustes realizados a las presiones iniciales para garantizar la mezcla admitida. Considerando la magnitud de dichas discrepancias, es necesario resaltar que estas son aceptables y se encuentran entre los valores esperados para los estudios computacionales de MCI [17]. Como se habló anteriormente, el mecanismo de reacción y los parámetros de chispa dependen únicamente de la composición del combustible y de la velocidad de giro del motor, respectivamente [35, 38]. Estos parámetros fueron los únicos que se ajustaron en el proceso de validación del modelo desarrollado. Por esta razón, es previsible que en el estudio de tendencias de los parámetros indicados del motor o sus EmC, los errores de los resultados simulados respecto a los reportados experimentalmente, no tengan un cambio considerable, si no se altera la composición del combustible o la velocidad de giro del motor. De esta forma es posible deducir que el modelo es aplicable para estudios de optimización donde no se modifiquen los parámetros ajustados en este capítulo, permitiendo observar las tendencias de las variables de interés respecto a los parámetros de entrada en la optimización, por ejemplo, respecto a la relación de equivalencia.

## 5. Optimización computacional

En este capítulo se presentan el análisis y los resultados del proceso de optimización realizado al motor Lombardini LGW-523, alimentado con el gas de síntesis seleccionado, a 2500 y 4500 [RPM]. Como se explica en el capítulo 1, se busca optimizar la masa de combustible para maximizar la eficiencia térmica indicada y minimizar las emisiones de NO del motor. Además, en la sección 4.1 se observa que para el modelo desarrollado, la masa de combustible inyectada y admitida es directamente proporcional a la presión inicial en el depósito de combustible. Debido a esto, optimizar la masa de combustible se reduce a optimizar dicha presión. De esta forma, en el proceso de optimización únicamente cambia el valor de la presión en el depósito y se mantienen constantes las demás entradas utilizadas para la simulación de los casos C1 y C3 en el proceso validación.

Con el objetivo de estudiar un amplio espectro en la relación de equivalencia, para considerar mezclas con un alto grado de pobreza ( $\phi < 0,6$ ) y riqueza ( $\phi > 2,0$ ) en combustible, se seleccionan los valores máximos y mínimos para la  $P_{dep}$  que puede tomar el algoritmo para cualquiera de los individuos evaluados. Además se restringen los valores de eficiencia térmica y EmC de NO, para garantizar que los resultados sean coherentes y acordes con la realidad [17, 79]. Se selecciona una probabilidad de mutación del 10 [%] con magnitud máxima igual al límite inferior en el rango predeterminado para la  $P_{dep}$  [79, 80, 81]. Por otro lado, el número de generaciones e individuos evaluados en cada generación, se seleccionaron con base en la capacidad computacional, buscando tener resultados representativos para el tiempo de cómputo disponible. En la tabla 14 se presentan las condiciones y restricciones utilizadas para los dos casos de optimización.

El algoritmo NSGA II fue escogido para la optimización del motor, debido al amplio acuerdo existente en la literatura respecto a su aplicabilidad en la mejora constante de MCI, buscando diseños y configuraciones de operación óptimas en estos dispositivos [17, 26]. Para el desarrollo de esta investigación fue necesario usar y mejorar un acople existente entre este algoritmo y un software de simulación tridimensional de motores. A continuación

se explica el funcionamiento del NSGA II teniendo acoplado KIVA para funcionar como la fuente de resultados analizables y pos-procesables en el algoritmo genético.

Tabla 14. Condiciones y restricciones para los casos de optimización.

[RPM]	Gen.	Indv.	Indv. totales	Rango $P_{dep}$ [kPa]	Límites Ef. Term. Ind. [%]	Límites Emisión NO [g]
2500	5	14	84	400 - 1600	0 - 50	0 - 0,1
4500	5	14	84	400 - 1600	0 - 50	0 - 0,1

## 5.1 Acople entre KIVA y el algoritmo NSGA II

El acople de KIVA al algoritmo NSGA II representa una herramienta útil y prometedora para la optimización computacional de MCI [17, 26]. Para lograr esto, se crea una subrutina enlazada al algoritmo NSGA II. De esta forma, en el momento en que el algoritmo requiere evaluar el desempeño de los individuos, dicha subrutina se encarga de llamar a KIVA para posteriormente retroalimentar el proceso de optimización con los resultados de las simulaciones llevadas a cabo en este último software. Con base en esto, la subrutina de acople se encuentra en el ciclo principal de cada generación, y funciona de acuerdo a los siguientes pasos.

- 1) En primer lugar se crea una carpeta para cada individuo a evaluar en la generación en cuestión.
- 2) En esta carpeta se introducen los archivos de entrada necesarios para la simulación del individuo en KIVA. Estos archivos son la malla del motor “kiva4grid”, “datahk” que contiene algunas propiedades termodinámicas de las especies evaluadas, “itape18” que estipula el movimiento de las válvulas a lo largo del ciclo simulado, e “itape5” el cual contiene las condiciones de entrada para el caso de estudio. En el anexo C se pueden consultar los archivos “itape5” base, utilizados para cada uno de los dos casos de optimización.
- 3) De esta forma, se procede a modificar el archivo “itape5” con la  $P_{dep}$  que el algoritmo NSGA II determinó para el individuo en cuestión.
- 4) Simulación de los individuos en KIVA. Este proceso inicia después de crear todas las carpetas que contienen cada uno de los individuos de la generación actual. El proceso de simulación puede realizarse en paralelo o en serie, dependiendo de la máquina computacional en que se vayan a realizar.

- 5) La subrutina evalúa constantemente si las simulaciones en KIVA ya terminaron, y si lo hicieron de forma satisfactoria o no. El algoritmo continúa siempre y cuando todos los individuos culminen su evaluación satisfactoriamente en KIVA. Esto se hace con el objetivo de evitar errores en los cálculos posteriores.
- 6) Lectura de los archivos de salida al terminar las simulaciones. Esto se realiza para cada individuo y tiene por objetivo recolectar los resultados necesarios para su posterior pos-procesamiento. En primer lugar, del archivo "otape12" se extrae la composición de la mezcla en la cámara de combustión, después de que se cierra la válvula de admisión, pero antes de que empiece la reacción química, caracterizando así la mezcla admitida. De este archivo también se toma la composición de la mezcla justo antes de que se abra la válvula de escape, para de esta forma tener una lectura completa de las EmC generadas por el individuo. Finalmente se realiza la lectura del archivo de salida "thermo.dat", principalmente para evidenciar el comportamiento de la presión y el volumen en la cámara de combustión.
- 7) Con base en las lecturas anteriores, se calculan y almacenan los valores de las funciones objetivo del proceso de optimización. En este caso el valor de la eficiencia térmica indicada y la emisión de NO.
- 8) También se calculan y almacenan otros parámetros operativos del motor. La PI, la IMEP, el ISFC, la  $m_{fuel}$ , la relación de equivalencia y las EmC de CO y CO<sub>2</sub>. Es necesario aclarar que los cálculos de los parámetros indicados del motor, se realizan a partir de la curva P-V como se explicó en la sección 4.3 y según se muestra en el anexo D.
- 9) Finalmente los valores de las funciones objetivo son entregados al algoritmo de optimización, para la evaluación del *ranking* y las distancias de aglomeración. Como se vio anteriormente, estos datos son necesarios para la realización de torneos y obtención de los individuos de la siguiente generación [80, 81].





Cabe resaltar que por fuera de la subrutina explicada anteriormente, el funcionamiento y comportamiento del algoritmo NSGA II es el mismo al explicado en la sección 2.2.

## 5.2 Resultados y análisis

Después de tener acoplado KIVA al algoritmo genético NSGA II se procede a optimizar la  $P_{dep}$  en el modelo desarrollado operando a 2500 [RPM] y 4500 [RPM], buscando maximizar la eficiencia térmica indicada y minimizar las emisiones de NO. Para este propósito la

optimización se realiza para una población de 14 individuos por 5 generaciones después de la población inicial. Además de los objetivos de la optimización, se estudia el comportamiento de diferentes parámetros y emisiones del motor. Los resultados obtenidos del proceso de optimización se comparan respecto a la operación convencional del motor cuando es alimentado con gasolina. Es decir respecto a los casos de referencia estudiados en la validación del modelo desarrollado. Más específicamente, los resultados de la optimización a 2500 [RPM] y a 4500 [RPM] se comparan respecto a los resultados computacionales y experimentales reportados en el capítulo anterior para los casos C2 y C4, respectivamente. Con este propósito, la tabla 15 muestra y explica las convenciones utilizadas para las figuras mostradas en este capítulo, las cuales conforman los resultados de la optimización computacional del motor Lombardini LGW-523-MPI.

Tabla 15. Convenciones utilizadas para las gráficas reportadas en la optimización.

Convención	Explicación
	Los asteriscos rojos representan los individuos de la generación 0 y de las primeras 4 generaciones siguientes.
	Los asteriscos negros representan los individuos de la última generación evaluada en la optimización.
	Las líneas azules continuas representan el resultado computacional del caso de referencia C2 a 2500 [RPM] o C4 a 4500 [RPM].
	Las líneas azules segmentadas representan el resultado experimental del caso de referencia C2 a 2500 [RPM] o C4 a 4500 [RPM].

La figura 8 muestra los resultados de la optimización computacional a 2500 [RPM] y a 4500 [RPM], en el espacio objetivo. Esta figura ilustra de forma específica el comportamiento de las emisiones de NO respecto a la eficiencia térmica indicada.

Como se observa en la figura 8, la optimización en ambos casos evidencia dos frentes. El frente de Pareto corresponde a la región de mezcla pobre ( $\phi < 1$ ), y el segundo o frente dominado a la zona de mezcla rica ( $\phi > 1$ ). La diferencia entre ambos frentes resalta que para los dos casos de optimización, a partir de aproximadamente el 20 [%] de eficiencia térmica indicada, las mezclas pobres presentan mejores resultados que las mezclas ricas, esto para los dos objetivos planteados en el proceso de optimización. Lo anterior es causado porque para los individuos cercanos a  $\phi = 1$  ya sea en la zona pobre o rica se pueden alcanzar eficiencias similares, mayores al 20 [%], pero las emisiones de NO son más elevadas para  $\phi > 1$  ya que se alcanzan temperaturas en la cámara de combustión que superan a las obtenidas para mezclas pobres. También es importante notar que a 4500 [RPM] todos los individuos de la última generación se ubicaron en el frente de Pareto,

mostrando, como es de esperarse, una preferencia en el proceso de optimización por las mezclas pobres. No obstante, a 2500 [RPM] esto último no se cumple, ya que algunos individuos finales se ubicaron en el frente dominado. A partir de lo anterior es posible deducir que los resultados de la optimización podrían mejorar con el estudio de más individuos o más generaciones. Teóricamente esto llevaría a que todos los individuos de la última generación se ubiquen en el frente de Pareto, y las zonas no exploradas se encuentren considerablemente más pobladas [17, 79, 80, 81].

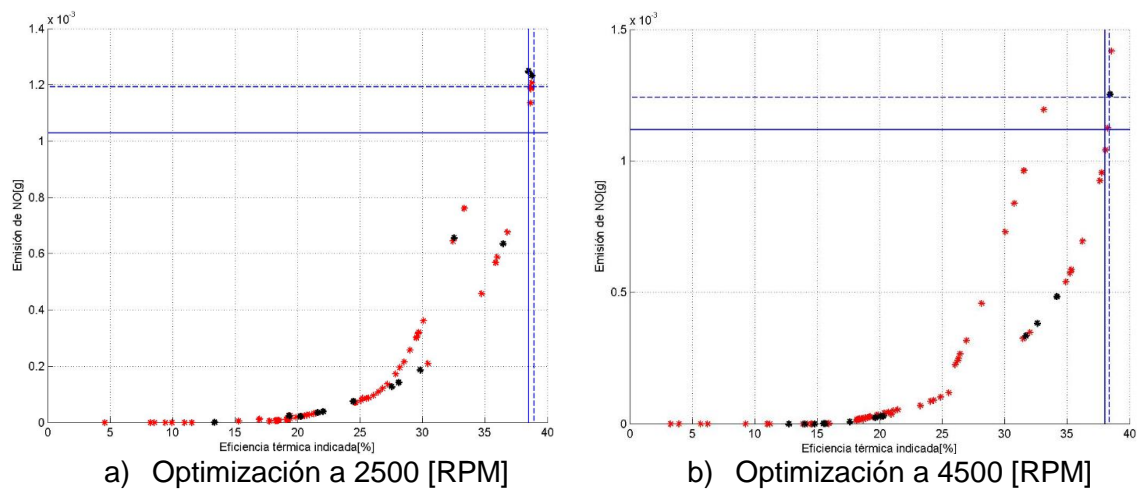


Figura 8. Emisión de NO [g] respecto a la eficiencia térmica indicada [%].

Por otro lado se evidencia que en ambas optimizaciones, la mayoría de individuos evaluados acarrean menores emisiones de NO que los casos de referencia. Sin embargo, muy pocos individuos logran acercarse, igualar o superar la eficiencia térmica indicada que tiene el motor en su operación convencional, presentando en ambos casos un comportamiento cuasi asintótico al acercarse al valor de referencia en la eficiencia. Además, en general se observa que a mayor eficiencia también son mayores las emisiones de NO, declarando un claro comportamiento inverso entre ambos objetivos planteados en los procesos de optimización. Esto último se debe a que los individuos con más eficiencia corresponden a mezclas cercanas a la estequiométrica, lo que ocasiona elevadas temperaturas en la cámara de combustión, impulsado la generación de NO [35, 38]. A 2500 [RPM] algunos individuos superan la eficiencia obtenida en el caso de referencia C2 computacional. Sin embargo, en ningún caso muestran mayor eficiencia a la referencia experimental, y siempre superan las emisiones de NO de la referencia computacional. De esta forma, a dicha velocidad la optimización no logra mejorar simultáneamente los objetivos planteados, respecto al caso C2 tanto computacional como experimental.

Por otro lado, a 4500 [RPM] se observa que dos individuos logran superar levemente las eficiencias térmicas indicadas, tanto para la referencia experimental como la computacional, donde uno de ellos presenta emisiones muy similares al caso C4 experimental. Análogamente dos individuos tienen mayor eficiencia al caso de referencia computacional, donde uno de ellos simultáneamente presenta menores emisiones de NO. Por esta razón, se tiene que la optimización a 4500 [RPM] logra superar o estar muy cerca en los objetivos respecto al caso de referencia, tanto computacional como experimental.

### 5.2.1 Análisis paramétrico del modelo desarrollado

Como se dijo anteriormente, para el modelo desarrollado, optimizar la relación de equivalencia se reduce a optimizar la masa de combustible inyectado, y consecuentemente la presión inicial en el depósito de combustible. Con base en esto las figuras 9 y 10 muestran el comportamiento del consumo de combustible y la relación de equivalencia, respectivamente, respecto a la presión inicial en el depósito del combustible.

En las figuras 9 y 10 se observa que tanto el consumo de combustible como la relación de equivalencia tienen un comportamiento cuasi lineal respecto a la presión inicial en el depósito de combustible. También se observa, como es de esperarse, que ambas variables son directamente proporcionales a la  $P_{dep}$ . La razón de estos comportamientos es principalmente que al tener invariante las demás condiciones de simulación, la masa de mezcla en ambos casos de optimización se mantiene casi constante para todos los individuos evaluados.

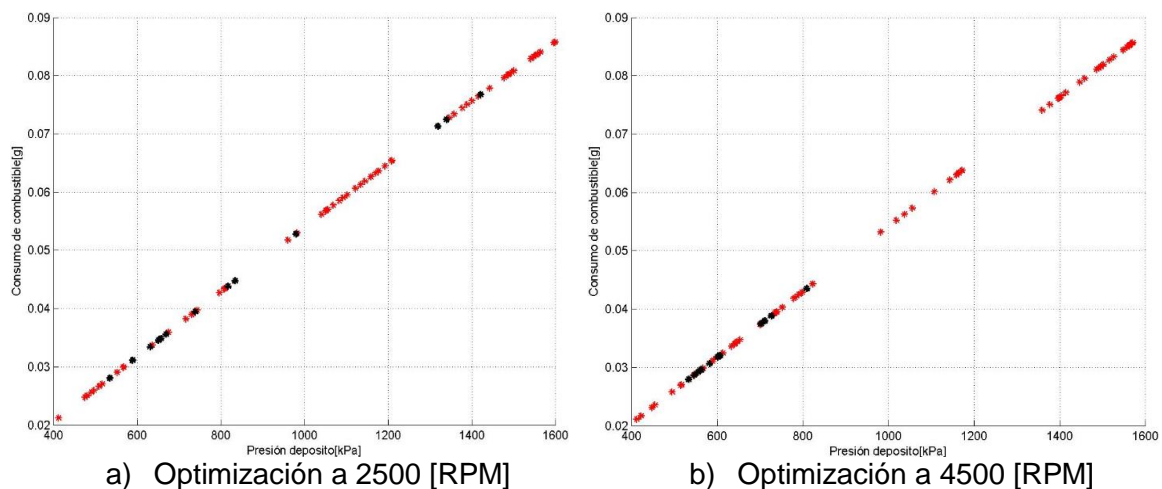


Figura 9. Consumo de combustible [g] respecto a la presión inicial en el depósito [kPa].



Por otro lado, se resalta un comportamiento similar a 2500 [RPM] y a 4500 [RPM] para el consumo de combustible, ya que se observa que para el mismo valor en la  $P_{dep}$  la  $m_{fuel}$  en ambos casos es bastante parecida. Esto es causado por dos comportamientos característicos del modelo desarrollado. En primer lugar las condiciones iniciales en el depósito de combustible son iguales para ambos casos de optimización, exceptuando la existencia de una pequeña diferencia en la temperatura de admisión. Finalmente el proceso de transferencia de masa entre el depósito y el ducto de admisión es muy rápido para ambos casos, lo que causa que la velocidad de giro del motor no tenga una influencia muy fuerte en la masa de combustible que queda en la cámara al cerrar la válvula de admisión.

Por su parte, en la figura 10 se observa que la relación de equivalencia para la misma presión en el depósito, siempre es mayor a 2500 [RPM] que a 4500 [RPM]. Esto se debe principalmente a que la masa de mezcla es menor a 2500 [RPM], por lo que para este caso se necesita una cantidad menor de combustible para aumentar la relación de equivalencia.

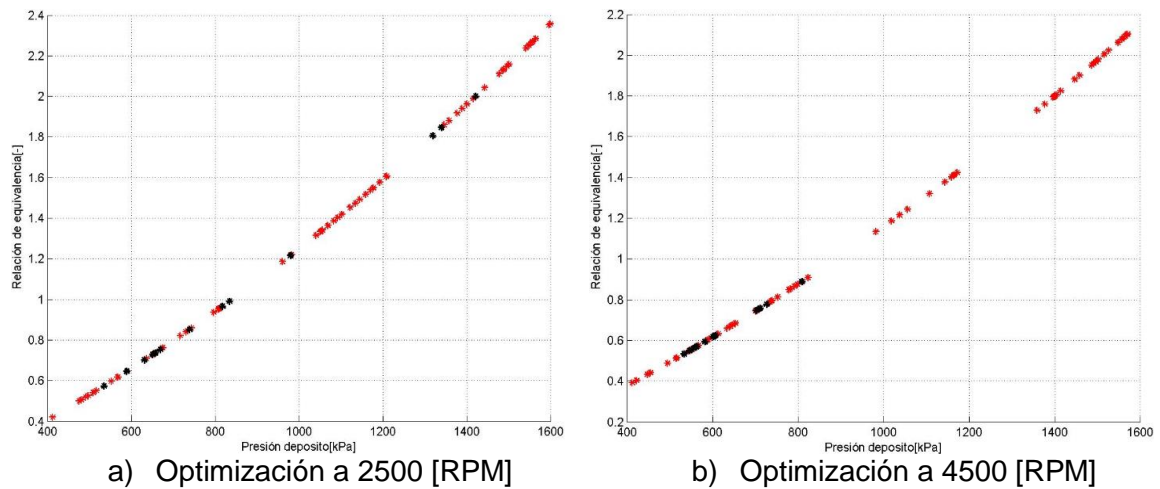


Figura 10. Relación de equivalencia [-] respecto a la presión inicial en el depósito [kPa].

De esta forma, a continuación se presenta el comportamiento de los parámetros indicados y las EmC del motor respecto a la relación de equivalencia en la cámara de combustión. Las figuras 11 y 12 muestran el comportamiento de la potencia indicada y la IMEP, respectivamente, para los dos casos de optimización.

Se observa que en ambos casos la PI y la IMEP tienen un comportamiento análogo. Esto se debe a que ambas variables son dependientes únicamente del trabajo indicado, y son directamente proporcionales a este. Tanto a 2500 [RPM] como a 4500 [RPM] el punto

máximo de estas variables se encuentra cerca a la mezcla estequiométrica, generalmente para una relación de equivalencia ligeramente mayor a 1 ( $1 < \phi < 1.15$ ). La razón de esto es que para mezclas cercanas a la estequiometría, el calor liberado en la combustión y el trabajo transferido al pistón son mayores [38, 39, 40].

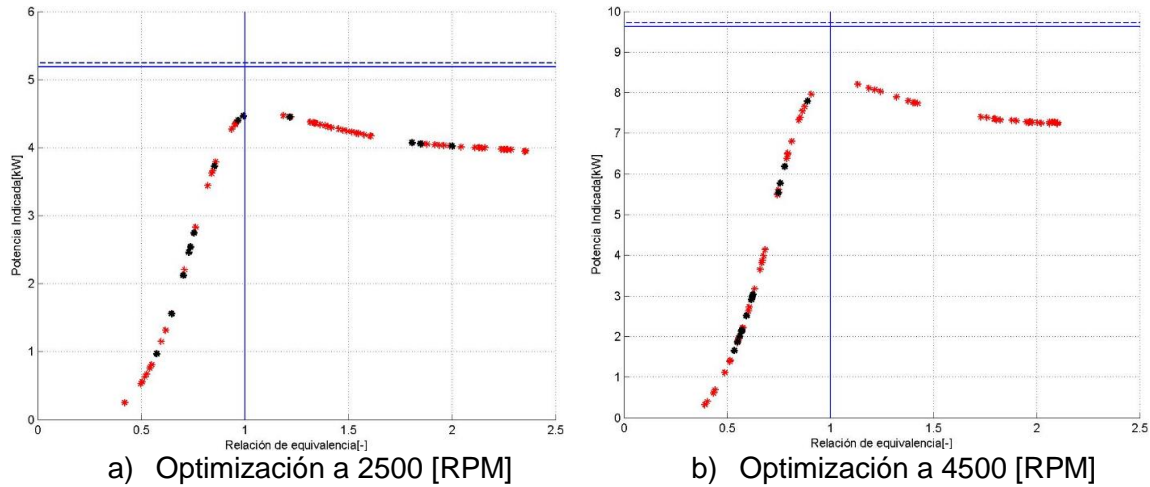


Figura 11. Potencia indicada [kW] respecto a la relación de equivalencia [-].

En las mezclas pobres la energía disponible inicialmente es muy baja, debido a la también baja cantidad de combustible que se tiene, lo que causa que la PI y la IMEP decrezcan drásticamente a medida que la relación de equivalencia también lo hace [35, 38].

Aunque en las mezclas ricas se tiene mayor energía inicial, la falta de comburente causa que quede combustible sin quemar, ocasionando que no se alcancen los valores de IMEP y PI que se tienen con una relación de equivalencia cercana a 1 [38, 39].

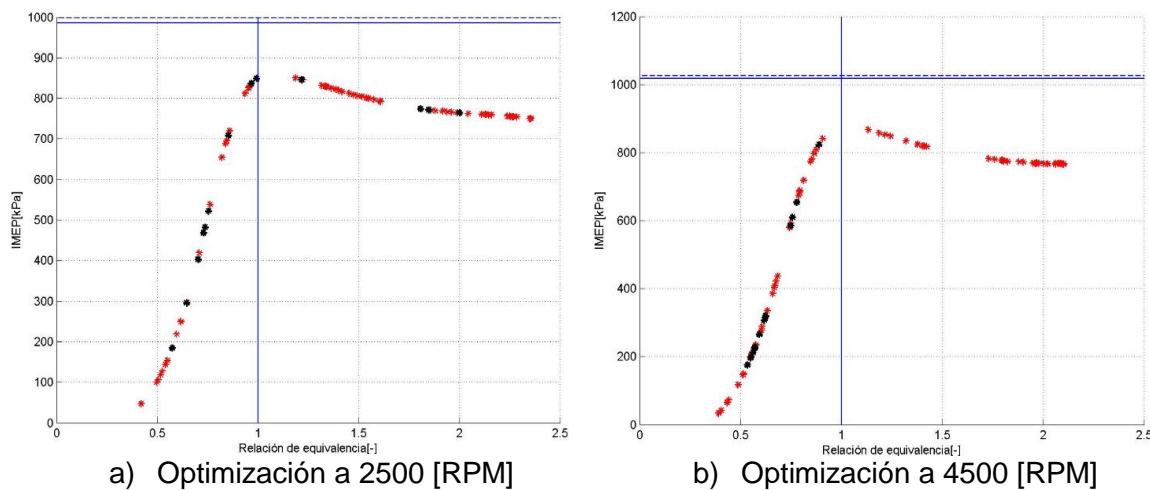


Figura 12. IMEP [kPa] respecto a la relación de equivalencia [-].

Por otro lado es evidente que sin importar la relación de equivalencia, al alimentar el motor con gas de síntesis no es posible alcanzar los valores de IMEP y PI que presenta la operación convencional del motor. Esto es causado principalmente por el bajo LHV que tiene el gas de síntesis respecto a la gasolina [35].

Según se ilustra, los valores en la IMEP a 2500 [RPM] son bastante cercanos a sus equivalentes a 4500 [RPM]. Este es un comportamiento esperado, y a partir de él se puede deducir que las diferencias en la PI son causadas principalmente debido al incremento en la velocidad de giro del motor.

Para analizar el rendimiento del motor respecto a la relación de equivalencia, las figuras 13 y 14 muestran el comportamiento del ISFC y la eficiencia térmica indicada, respectivamente. Estas dos variables tienen un comportamiento inverso entre sí, respecto a la relación de equivalencia. Esto se debe a que el ISFC cuantifica el consumo de combustible necesario para generar una cantidad de energía predeterminada, mientras la eficiencia térmica indicada especifica la fracción de la energía suministrada en el combustible que efectivamente es transferida por los gases de combustión al pistón [39, 40]. De la misma manera que la IMEP y la PI, el ISFC y la eficiencia presentan sus mejores valores para relaciones de equivalencia cercanas a la unidad, en este caso dichos valores se encuentran para relaciones de equivalencia ligeramente pobres ( $0.88 < \phi < 1$ ).

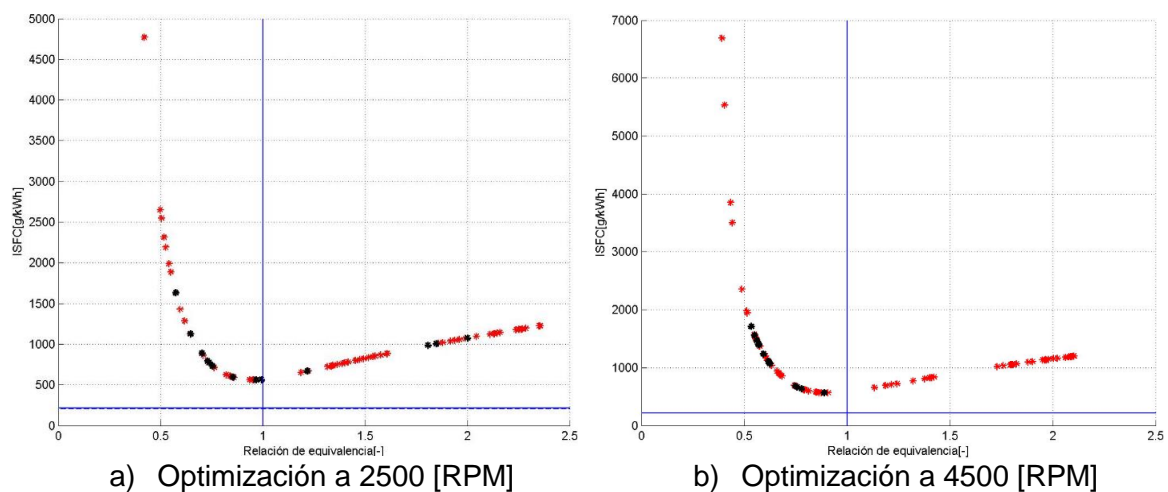


Figura 13. ISFC [g/kW-h] respecto a la relación de equivalencia [-].

Las bajas eficiencias térmicas y elevados ISFC en las mezclas pobres se deben principalmente a que mezclas con un relativamente bajo contenido de combustible, no logran transferir energía suficiente al pistón [38].

Por otro lado, a medida que se enriquece la mezcla con combustible la eficiencia térmica aumenta y el ISFC disminuye. Sin embargo, si este enriquecimiento continua después de la mezcla estequiométrica, el rendimiento del motor vuelve a decrecer. Esto último es debido a la energía desperdiciada que queda en el combustible sin quemar [35, 38].

Se evidencia que sin importar la relación de equivalencia, el ISFC del gas de síntesis siempre va a superar al reportado para el caso de referencia en cuestión. Sin embargo, como se vio anteriormente, las máximas eficiencias alcanzadas en la optimización, se acercan bastante, o en algunos casos superan a los valores de referencia, computacionales o experimentales. Esto es causado nuevamente por la diferencia en el LHV de ambos combustibles. Por esta razón, el motor debe alimentarse con mayor masa de gas de síntesis para generar una determinada cantidad de potencia, incrementado así el ISFC. Sin embargo, la fracción de la energía inicial disponible en la mezcla, que efectivamente es transmitida por los gases de combustión al pistón, es similar o en algunas ocasiones mayor para el gas de síntesis en comparación a los casos de referencia cuando el motor es alimentado con gasolina.

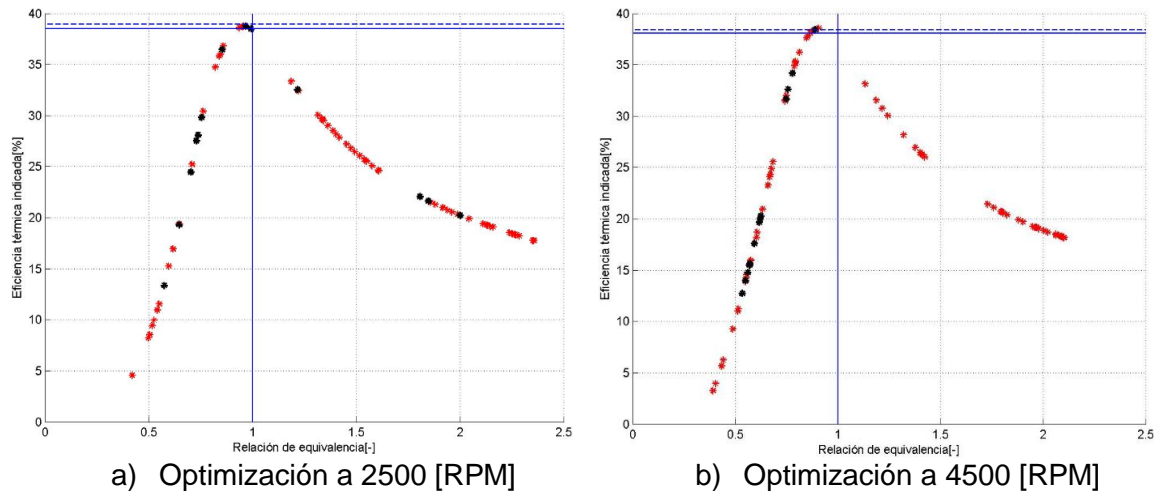


Figura 14. Eficiencia térmica indicada [%] respecto a la relación de equivalencia [-].

La figura 15 muestra el comportamiento de las emisiones de NO respecto a la relación de equivalencia para los dos casos de optimización. Como es de esperarse para ambos casos, el pico en la emisión de NO se alcanza para mezclas cercanas a la estequiometría, coincidiendo con el punto de máxima eficiencia y mínimo ISFC. Como se dijo anteriormente esto se debe a que en estas zonas la liberación de energía en la combustión es mayor, llevando a altas temperaturas en la cámara de combustión, lo que según el modelo cinético

desarrollado por Zeldovich y utilizado en este trabajo, es la principal fuente de formación de óxidos de nitrógeno [35, 38].

Por otro lado, a medida que se enriquece o empobrece la mezcla, las emisiones de NO decrecen rápidamente, llegando en algunos casos a ser nulas. En el caso de las mezclas pobres, este comportamiento es causado por la baja energía disponible en la mezcla inicial, ocasionando que la liberación de energía en la combustión y por ende las temperaturas en la cámara también tengan valores relativamente pequeños [8, 9, 35, 38]. Por su parte, en las mezclas con relaciones de equivalencia elevadas, las emisiones de NO decrecen a causa de que el exceso de combustible no permite una gran liberación de energía [35, 38]. A partir de esto, es posible destacar que para mezclas con relaciones de equivalencia menores a 0,8 o mayores a 1,2, las emisiones de NO siempre son menores a las obtenidas para los casos de referencia, tanto computacionales como experimentales.

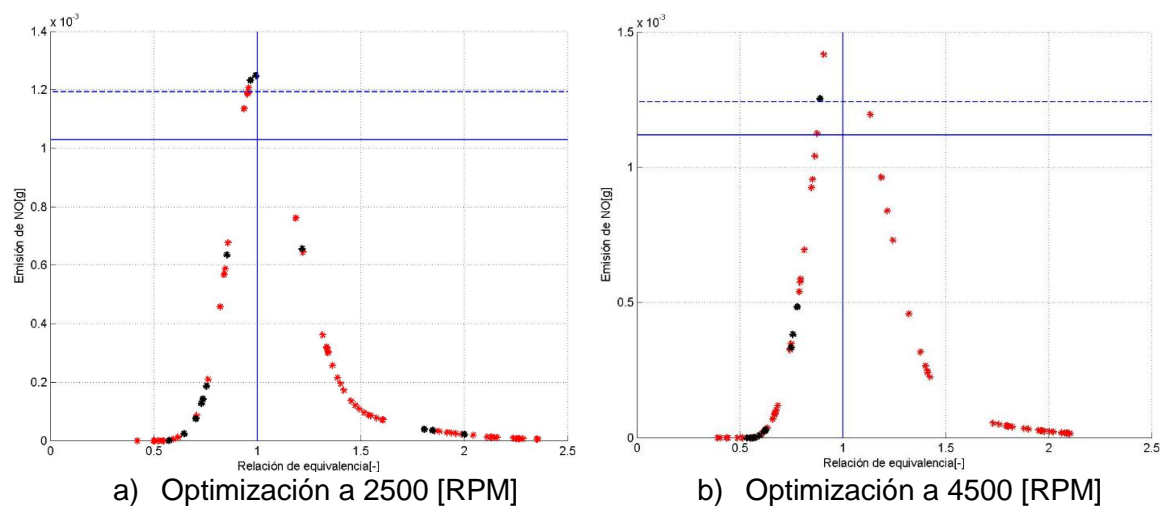


Figura 15. Emisión de NO [g] respecto a la relación de equivalencia [-].

Según se observa en el capítulo 1, las emisiones de óxidos de carbono son problemáticas en la combustión de gases de síntesis [7, 8, 9, 13, 28, 29]. Por esta razón es necesario estudiar su comportamiento para los procesos de optimización realizados. Con base en esto, las figuras 16 y 17 ilustran el comportamiento de las emisiones de  $\text{CO}_2$  y  $\text{CO}$ , respectivamente, respecto a la relación de equivalencia.

En las figuras 16 y 17 es posible observar que las emisiones más altas de  $\text{CO}$  y  $\text{CO}_2$  se presentan para las mezclas ricas. Esto se debe principalmente a la existencia de estas especies en la composición del combustible, lo que ocasiona un incremento en las emisiones a medida que la relación de equivalencia aumenta [8, 9, 26].

Como un resultado esperado, el comportamiento de las emisiones de CO es inverso al de las emisiones de CO<sub>2</sub> [35, 38, 73]. Se observa que los puntos de inflexión coinciden para valores cercanos en la relación de equivalencia, pero si para el CO<sub>2</sub> se tiene un máximo, el CO presenta un mínimo. Este fenómeno es causado por el equilibrio presente entre estas dos especies, implementado en el modelo químico utilizado en este trabajo, el cual causa un aumento en la masa de CO a medida que el contenido de CO<sub>2</sub> disminuye y viceversa [73].

En la figura 16 se observa que para ambos casos después de 1,5 en la relación de equivalencia las emisiones de CO<sub>2</sub> aumentan. Lo anterior es un comportamiento ilógico ya que la ausencia de oxígeno en las mezclas ricas no permitiría la oxidación del CO para formar CO<sub>2</sub>. En el modelo desarrollado esto se debe a que como se observa en la tabla 9, para el gas de síntesis la reacción de oxidación con menor temperatura de activación es precisamente la del CO para generar CO<sub>2</sub>. Además, en esta reacción se observa que la formación de CO<sub>2</sub> no solo se ve impulsada por una mayor presencia de oxígeno, sino también por una mayor cantidad de CO en la mezcla inicial. Finalmente a causa de la composición del combustible, como se discutió anteriormente, la presencia de CO y CO<sub>2</sub> en la mezcla inicial aumenta para mayores relaciones de equivalencia, lo que en conjunto con el equilibrio que debe existir entre estas dos especies según las reacciones (28) y (38) del modelo cinético implementado, repercute en mayores emisiones de CO<sub>2</sub>.

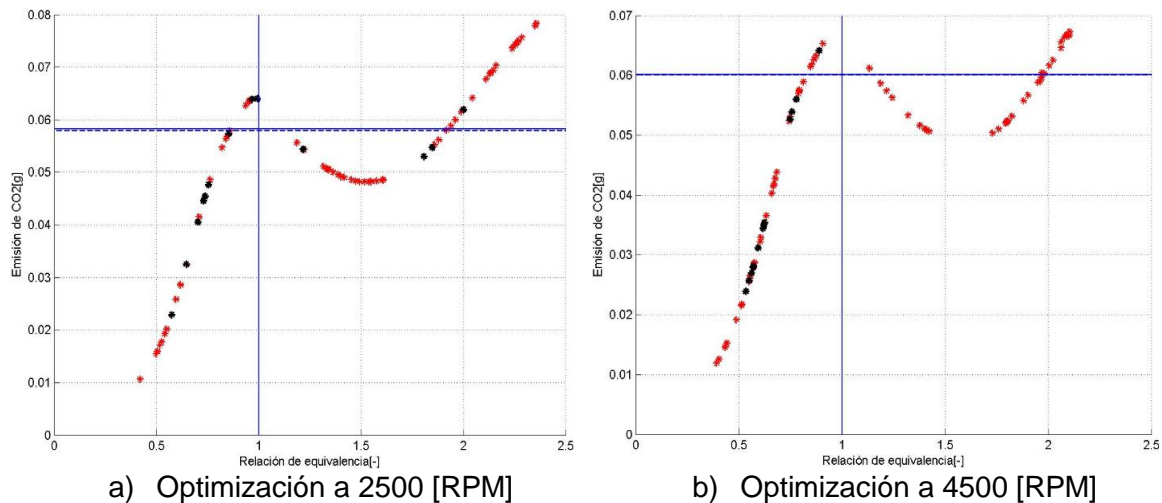


Figura 16. Emisión de CO<sub>2</sub> [g] respecto a la relación de equivalencia [-].

También se observa que las emisiones de CO<sub>2</sub> para el gas de síntesis respecto a la operación convencional del motor son menores en casi todo el dominio estudiado,



exceptuando para mezclas cercanas a la estequiométrica o con relaciones de equivalencia mayores a 1,85.

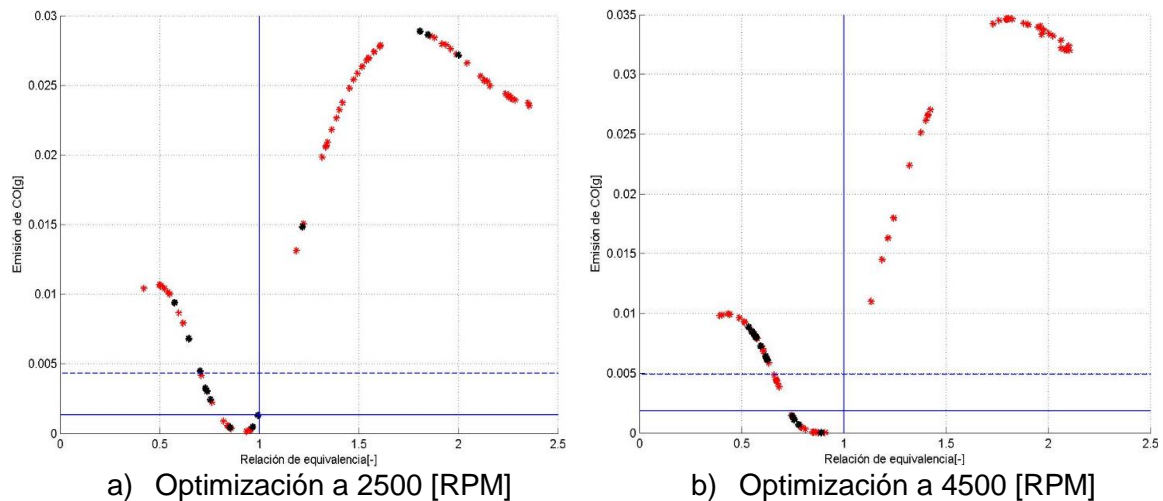


Figura 17. Emisión de CO [g] respecto a la relación de equivalencia [-].

Por su parte las emisiones CO son menores que la referencia experimental cuando la relación de equivalencia es menor a 1 y mayor a aproximadamente 0,7. Este comportamiento se repite respecto a la referencia computacional, pero para relaciones de equivalencia entre aproximadamente 0,8 y 1.

De esta forma es posible deducir que para las mezclas donde el rendimiento del motor es el más alto que se obtuvo en la optimización computacional, las emisiones contaminantes de CO también presentan sus valores más bajos.

Esto se ilustra en la figura 18, la cual presenta el comportamiento que tienen las emisiones de CO respecto a la eficiencia térmica indicada. Se observa que los mínimos de emisiones de CO se presentan en la misma zona de máxima eficiencia, donde a medida que la mezcla se enriquece o se empobrece a partir de ese punto, la eficiencia decrece y las EmC de CO aumentan. La figura 18-a) muestra que a 2500 [RPM] las emisiones de CO son menores que ambas referencias, para las mezclas pobres, después de tener eficiencias mayores al 34 [%]. Este fenómeno también se presenta en la figura 18-b) donde a 4500 [RPM], en las mezclas pobres se tienen menores cantidades de CO emitido, para eficiencias térmicas indicadas aproximadamente mayores al 31 [%]. Con base en lo anterior, la figura 18 evidencia que para ambos casos de optimización, fue posible alcanzar valores cercanos, o en algunas ocasiones mayores, a la eficiencia térmica indicada, y simultáneamente

menores emisiones de CO, respecto a lo reportado experimental o computacionalmente para las respectivas configuraciones de referencia estudiadas.

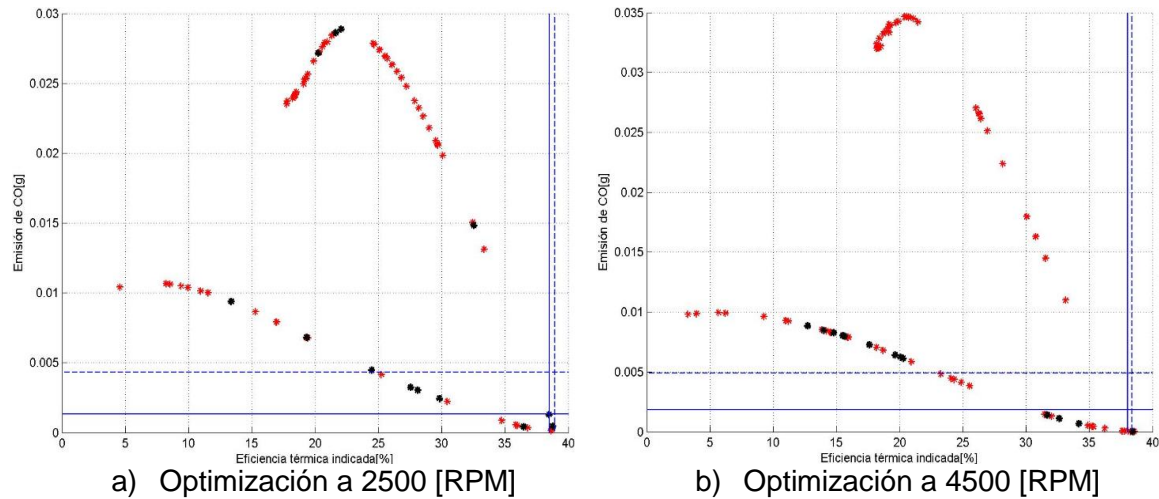


Figura 18. Emisión de CO [g] respecto a la eficiencia térmica indicada [%].

De esta forma, a partir de los procesos de optimización realizados, se observa que el rendimiento del motor representado, estudiado y analizado en variables como la IMEP, la PI, el ISFC y la eficiencia térmica indicada; presenta sus valores óptimos para mezclas con una relación de equivalencia cercana a la unidad. Este es el mismo caso para las emisiones de CO. No obstante, en esta zona también se presentan las mayores emisiones de NO y elevadas emisiones de CO<sub>2</sub>. Generalmente, a medida que la mezcla se aleja de la región estequiométrica el rendimiento del motor junto a las EmC de NO y CO<sub>2</sub> decrecen, mientras las emisiones de CO aumentan. Por estas razones, dependerá de la aplicación y los requerimientos de la misma, el seleccionar la relación de equivalencia adecuada para alimentar el motor Lombardini LGW-523-MPI con el gas de síntesis estudiado.

Por otro lado, al comparar los resultados de cada optimización con sus respectivas referencias al operar el motor con gasolina de forma convencional, se observa que sin la implementación de dispositivos adicionales como turbo cargadores, es imposible generar la misma potencia con el gas de síntesis respecto a la obtenida con gasolina. Sin embargo, en ambos casos, para relaciones de equivalencia aproximadamente entre 0,88 y 1, es posible obtener eficiencias térmicas indicadas y emisiones de NO cercanas a las reportadas experimentalmente y computacionalmente al alimentar el motor con gasolina, donde simultáneamente se tienen menores EmC de CO. Finalmente es destacable que a 4500 [RPM] la optimización encontró individuos que tienen mayor eficiencia, y



simultáneamente menores emisiones de CO y NO respecto al caso de referencia C4. Con base en estas observaciones, es factible recomendar el uso del gas de síntesis en el motor Lombardini LGW-523-MPI, ya que bajo las configuraciones óptimas encontradas, es posible obtener valores cercanos o en algunos casos mejores, para la eficiencia térmica indicada y las emisiones contaminantes de CO y NO, respecto al funcionamiento convencional del motor.

### 5.2.2 Análisis de los individuos de la última generación

En el anexo E se encuentran reportados los resultados obtenidos para los 14 individuos finales de cada proceso de optimización. Las tablas de dicho anexo muestran los datos y resultados exactos de cada individuo, por otro lado en gráficas se muestra la evolución temporal de la presión, el HR acumulado y la fracción de masa quemada; además del comportamiento de la presión respecto al volumen en la cámara de combustión.

Con base en los resultados ilustrados en el anexo E, se estudia la viabilidad de implementación real que tiene cada uno de los individuos de la última generación, para la optimización a 2500 [RPM] y 4500 [RPM]. Con este objetivo, a continuación se estudia el comportamiento que presenta la presión máxima, el momento en que se da dicha presión, el HR acumulado por ciclo y la velocidad a la que se da la combustión. Nuevamente, los resultados de las optimizaciones se comparan respecto a los casos de referencia C2 y C4, respectivamente. Cabe resaltar que a 4500 [RPM] solo se dispone de la referencia computacional, esto debido a que no se tienen los datos experimentales necesarios para el caso C4.

Empezando, la figura 19 ilustra la tendencia de la  $P_{\max}$  respecto a la relación de equivalencia. Se observa que a medida que la relación de equivalencia aumenta, la presión máxima en la cámara de combustión también se incrementa. A 2500 [RPM] este comportamiento se mantiene hasta que la relación de equivalencia toma un valor aproximado de 1,8, ya que a partir de este punto la presión máxima empieza a decrecer. Por otro lado, la presión máxima supera los casos de referencia para relaciones de equivalencia mayores a aproximadamente 0,95. Este comportamiento únicamente es visible para la optimización a 2500 [RPM], aún así se espera un comportamiento análogo a 4500 [RPM], para relaciones de equivalencia mayores al máximo valor reportado. La presencia de presiones más altas a las obtenidas al alimentar el motor con gasolina,

conlleva problemas con el funcionamiento normal y la integridad del motor [17, 38, 39, 40]. Esto es debido principalmente a que el motor fue diseñado originalmente para operar bajo las condiciones de referencia, y de esta forma soportar las cargas impuestas por dichas configuraciones, por lo que excederlas no es una práctica recomendable.

Siguiendo, la figura 20 ilustra el momento en que se da la máxima presión respecto a la relación de equivalencia. En la figura 20-a) se observa un comportamiento funcional de esta variable respecto a la relación de equivalencia, para la optimización a 2500 [RPM]. Sin embargo, la figura 20-b) muestra que a 4500 [RPM] no se observan tendencias claras del momento de máxima presión en función de la relación de equivalencia.

También es posible notar que la máxima presión se presenta en todos los casos después del punto muerto superior. Este es un comportamiento deseado, ya que a partir del PMS el pistón viaja en la misma dirección a la fuerza que es aplicada sobre él, la cual es debida a la presión ejercida por los gases de combustión [38, 39]. A 2500 [RPM] se observa que el ángulo del cigüeñal de máxima presión decrece cuando la mezcla es muy rica en combustible.

Esta observación explica porque las mezclas con relaciones de equivalencia elevadas, a pesar de presentar valores altos en la presión máxima, no logran alcanzar los niveles de rendimiento en el motor, que si se consiguen con mezclas cercanas a la estequiométrica.

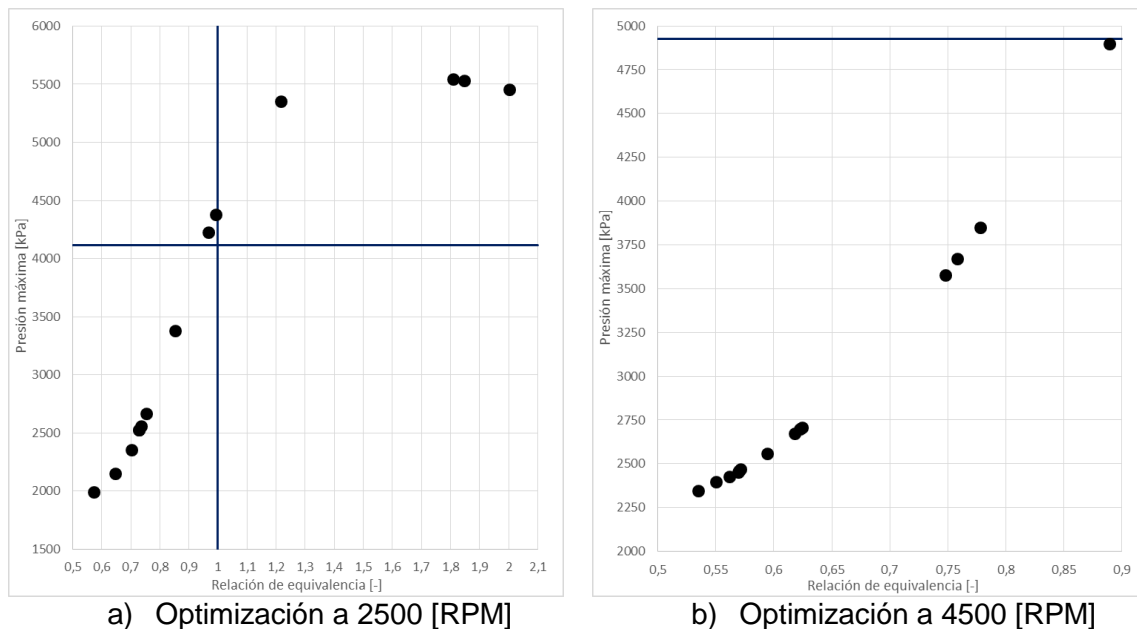


Figura 19. Presión máxima [kPa] respecto a la relación de equivalencia [-].

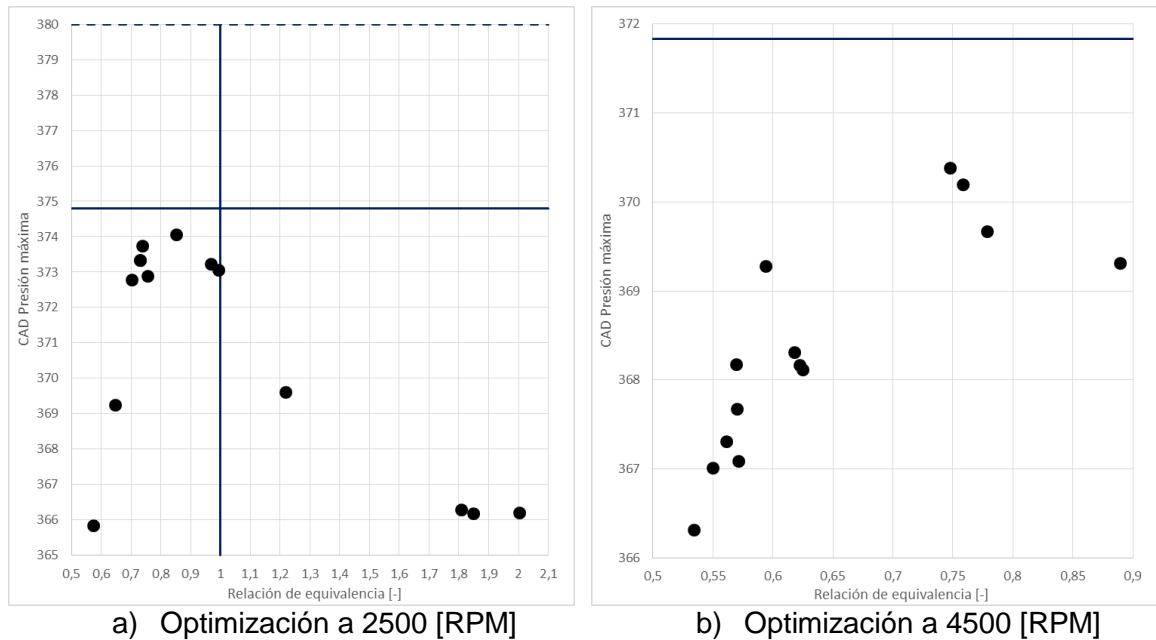


Figura 20. Ángulo del cigüeñal de máxima presión [CAD] respecto a la relación de equivalencia [-].

Como se vio anteriormente, entre más lejana está la  $P_{\max}$  del PMS, el rendimiento y la generación de potencia en el motor se ven beneficiados. Al observar la figura 20 es evidente que todos los individuos evaluados presentan su máxima presión más tempranamente que los casos de referencia C2 y C4. Esto se debe al bajo LHV y energía liberada en la combustión del gas de síntesis, sustentando por qué no es posible alcanzar las potencias generadas con gasolina en el motor estudiado.

La figura 21 expone el comportamiento del HR acumulado por ciclo respecto a la relación de equivalencia. Como es de esperarse, en la figura 21-a) se observa un comportamiento similar al que presenta la potencia indicada respecto a la relación de equivalencia, en la optimización a 2500 [RPM]. Esto se debe principalmente a que el HR acumulado por ciclo, cuantifica la energía liberada en la combustión, y el trabajo indicado evidencia cuanta de dicha energía es transferida efectivamente al pistón por los gases quemados. Por esta razón el WI y consecuentemente la PI son directamente proporcionales al HR acumulado por ciclo [38, 39, 40]. Nuevamente, destaca el hecho que ningún individuo logra superar el HR acumulado presente en los casos de referencia. Esto se debe, de nuevo, a que el LHV del gas de síntesis es más de dos veces menor al LHV de la gasolina. Lo cual ocasiona que en la operación convencional del motor, la combustión libere una mayor cantidad de energía [35, 38, 39, 40].

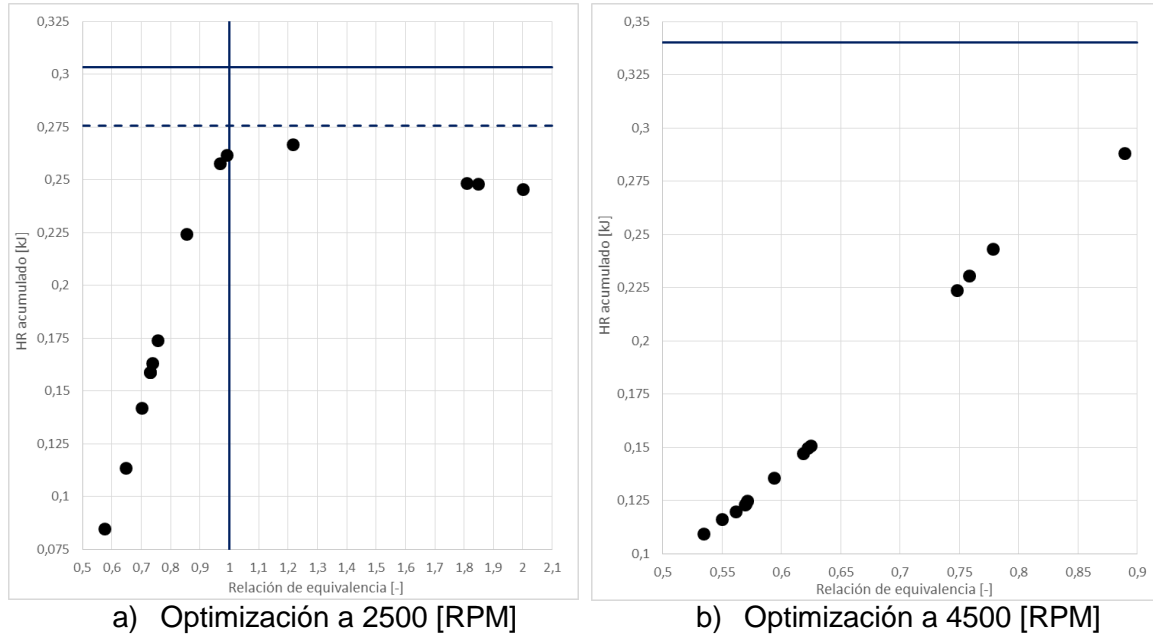


Figura 21. HR acumulado por ciclo [kJ] respecto a la relación de equivalencia [-].

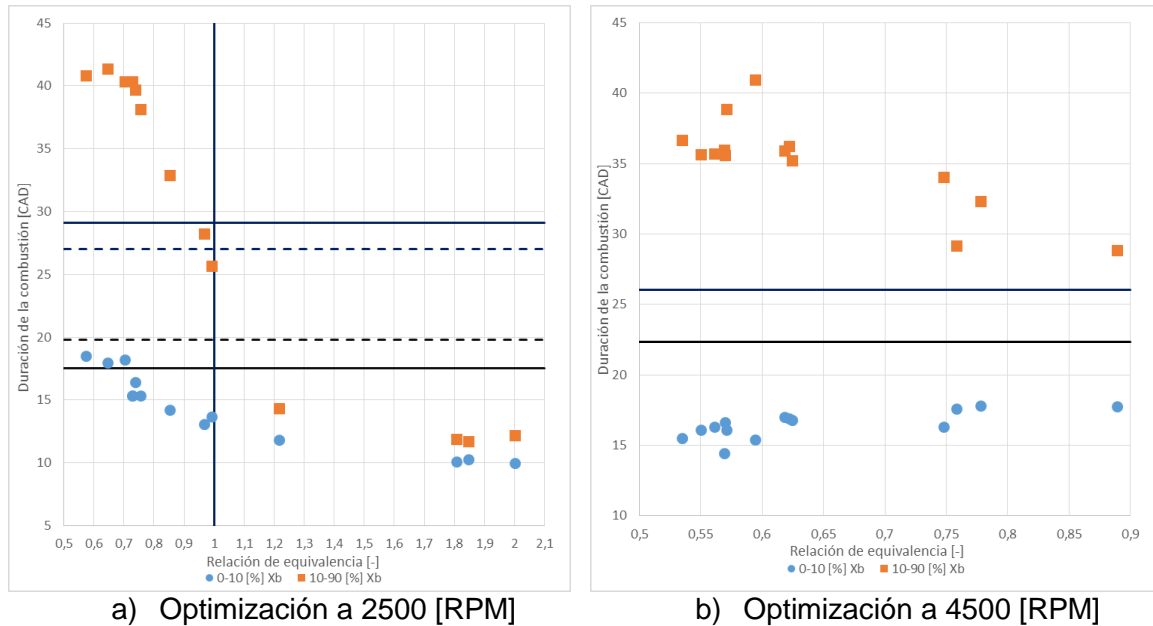


Figura 22. Duración de la combustión [CAD] respecto a la relación de equivalencia [-].

Finalmente, la figura 22 muestra el comportamiento que tiene la duración de la combustión, respecto a la relación de equivalencia. Esta variable tiene unidades de grados en el ángulo del cigüeñal y se divide en dos secciones. La primera corresponde a la combustión que se da entre el 0 [%] y el 10 [%] de la fracción de masa quemada, y la otra se centra en la duración que tiene la combustión entre el 10 [%] y el 90 [%] de la fracción de masa

quemada [38]. En la figura 22, las líneas azules se cruzan para los valores de referencia correspondientes a la duración entre el 10 [%] y el 90 [%] de  $X_b$ , mientras que las negras lo hacen para las referencias correspondientes al intervalo de 0 [%] a 10 [%].

Con base en esto, es posible observar que a 2500 [RPM] la combustión se hace más rápida para los dos rangos de  $X_b$  estudiados, a medida que la mezcla se enriquece en combustible. En general se observa que partir de relaciones de equivalencia mayores a 0,9 la combustión es más rápida para el gas de síntesis respecto al caso de referencia C2. Como se dijo anteriormente, esto se debe al aumento del contenido de hidrogeno en la mezcla inicial, lo cual es causante de mayores velocidades de llama, llevando a que esta se propague en menor tiempo, acelerando así la combustión [93]. Como se observa en la literatura, diversos estudios coinciden en que los gases de síntesis, dependiendo de la cantidad de hidrogeno que exista en su composición, presentan su máxima velocidad de llama laminar para relaciones de equivalencia mayores a 2,0 y menores a 3,0 [93]. Por esta razón es previsible que este comportamiento persista al menos hasta relaciones de equivalencia cercanas a 2,0 [93].

Por su parte, a 4500 RPM se observa que para todos los individuos de la última generación la combustión siempre es más lenta para el gas de síntesis en comparación con la gasolina. Esto se debe al rápido aumento de la presión en la cámara de combustión que presenta el caso de referencia C4 computacional durante el proceso de combustión, lo que acarrea un gran incremento en la velocidad de la combustión según se observa en el cálculo de la fracción de masa quemada (ver anexo D.5).

Cuando el fenómeno de combustión se presenta a velocidades muy elevadas, como se observa para 2500 [RPM] y relaciones de equivalencia superiores a 1,2, pueden efectuarse problemas con el funcionamiento del motor y las emisiones contaminantes. En primer lugar, estas velocidades tan altas ocasionan que gran parte del combustible quede sin quemar, lo que conlleva un incremento en las emisiones de CO e hidrocarburos sin quemar [35, 38, 92]. Por otro lado, el tener una combustión rápida puede acarrear problemas de golpeteo en los MCI-SI debido a altas presiones en la cámara de combustión, lo cual tiende a generar daños en el dispositivo afectando su funcionamiento e integridad [38, 39].



## **6. Conclusiones y recomendaciones**

### **6.1 Conclusiones**

El modelado de motores con válvulas permite estudiar el ciclo completo del dispositivo. Lo que teóricamente llevaría a conseguir resultados en las simulaciones más veraces y acordes con la realidad [45, 48, 49]. Particularmente en este trabajo, involucrar el sistema de válvulas permitió considerar el proceso de mezcla real, y la influencia que tienen los procesos de admisión y escape en las condiciones de flujo en la cámara, el proceso de combustión, las emisiones contaminantes y el rendimiento del motor. Sin embargo, en la revisión bibliográfica realizada no se encontraron estudios computacionales de motores en ciclo abierto alimentados con gases de síntesis. Esto se debe principalmente a la dificultad que supone la implementación del sistema de válvulas en el dominio computacional.

En la ejecución y análisis de las simulaciones de este trabajo, se logró concluir que el modelo desarrollado del depósito de combustible logra emular en KIVA con éxito la inyección para combustibles gaseosos implementada en el montaje experimental expuesto en [8]. Con dicho modelo es posible ajustar la masa y demás condiciones del combustible inyectado, a partir de la ley de gases ideales, donde la velocidad de inyección dependerá principalmente del volumen del depósito. Este volumen se seleccionó buscando que la mayoría de la masa inyectada entrara efectivamente en la cámara de combustión, sin la necesidad de tener presiones iniciales muy elevadas. En los estudios paramétricos realizados se observó que con la implementación de este modelo la masa de combustible admitida y la relación de equivalencia en la cámara de combustión tienen un comportamiento cuasi lineal respecto a la masa inyectada y por ende respecto a la presión inicial en el depósito. De esta forma el modelo permitió que la optimización de la relación de equivalencia se redujera a la optimización de la presión inicial en el depósito de combustible, lo que concuerda con lo postulado inicialmente para este trabajo.

Los parámetros de chispa y el mecanismo de reacción dependen únicamente de la composición del combustible y de la velocidad de giro del motor [35, 38]. Estas variables fueron las únicas que se ajustaron en proceso de validación del modelo desarrollado, los demás parámetros provienen de previas consideraciones teóricas o de los datos experimentales que se obtuvieron [8, 83, 84]. De esta forma, para casos adicionales de simulación, si no se altera la composición del combustible o la velocidad de giro del motor, los errores se mantendrán acotados entre valores similares a los encontrados en los casos de validación estudiados. Entonces, es posible concluir que el modelo es aplicable en la optimización de la relación de equivalencia en la cámara de combustión, y el estudio de las tendencias que presentan los parámetros indicados y las EmC del motor Lombardini LGW-523-MPI alimentado con el gas de síntesis estudiado, donde los resultados se mantendrán condicionados por errores similares a los encontrados en el proceso de validación.

Al observar los resultados de ambos procesos de optimización, se evidencia el comportamiento inverso que tiene el cumplimiento de los objetivos planteados. En general, tanto desde el extremo de mezcla rica como desde el individuo más pobre en combustible, la eficiencia térmica indicada se incrementa a medida que la mezcla se acerca a la estequiometría, sin embargo, esto también ocasiona que las emisiones de NO aumenten. Como se observó en la hipótesis planteada, este es un comportamiento esperado, ya que las mezclas estequiométricas presentan las temperaturas de cámara más elevadas, favoreciendo el rendimiento del motor pero al mismo tiempo impulsando la formación de óxidos de nitrógeno por el mecanismo de Zeldovich.

Con base en los resultados de la optimización computacional, es posible concluir que el rendimiento del motor representado en variables como la IMEP, la PI, el ISFC y la eficiencia térmica indicada presenta sus valores óptimos para mezclas con una relación de equivalencia cercana a la unidad ( $0.88 < \phi < 1.15$ ). Además, para mezclas cerca de la estequiometría las emisiones de CO son las más pequeñas posibles. No obstante, en esta zona también se presentan las mayores emisiones de NO y elevadas emisiones de CO<sub>2</sub>. Generalmente, a medida que la mezcla se aleja de la región estequiométrica el rendimiento del motor junto a las EmC de NO y CO<sub>2</sub> decrecen, mientras las emisiones de CO aumentan. Por estas razones, dependerá de la aplicación y los requerimientos de la misma, el seleccionar la relación de equivalencia adecuada para alimentar el motor Lombardini LGW-523-MPI con el gas de síntesis estudiado.



En conclusión, al comparar los resultados de cada optimización con la operación del motor alimentado con gasolina, se observa que sin recurrir a dispositivos adicionales que mejoren el funcionamiento del motor, como turbo cargadores, es imposible generar la misma potencia con el gas de síntesis respecto a la obtenida con gasolina, esto se debe a la gran diferencia que existe entre el LHV del gas de síntesis y de la gasolina, concordando con la hipótesis presentada inicialmente. Sin embargo, tanto a 2500 [RPM] como a 4500 [RPM], con valores en la relación de equivalencia entre 0,88 y 1, es factible obtener eficiencias térmicas indicadas y emisiones de NO cercanas a las reportadas experimentalmente y computacionalmente para los casos de referencia C2 y C4, donde simultáneamente se tienen menores EmC de CO respecto a dichas referencias. Por otro lado, es destacable que a 4500 [RPM] la optimización encontró individuos que tienen mayor eficiencia, y al mismo tiempo menores emisiones de CO y NO respecto al caso de referencia C4. Esto permite deducir que la implementación real de motores alimentados con gases de síntesis, es una práctica recomendable cuando los requerimientos de potencia no son muy exigentes.

Partiendo de las anteriores observaciones, se concluye que es factible recomendar el uso del gas de síntesis en el motor Lombardini LGW-523-MPI, esto debido a que considerando las configuraciones óptimas encontradas, es posible obtener valores cercanos o en algunos casos mejores, para la eficiencia térmica indicada y las emisiones contaminantes de CO y NO, respecto al funcionamiento convencional del motor. Específicamente se recomienda para los individuos que reportaron la máxima eficiencia encontrada, esto corresponde a 2500 [RPM] alimentar el motor con una relación de equivalencia en la cámara de combustión de 0,9672, y a 4500 [RPM] con una relación de equivalencia de 0,9083. No obstante, en la implementación real deben tenerse en cuenta los problemas que acarrea el gas de síntesis al tener valores de  $P_{max}$  y velocidades de combustión más altas a las conseguidas alimentando el motor con gasolina.

Por otro lado, no sobra decir que para considerar los resultados reportados en este trabajo, deben tenerse en cuenta los errores que obtuvo el modelo desarrollado en comparación con los resultados experimentales reportados en [8]. Por ejemplo, en los parámetros indicados del motor, estas diferencias para los casos en que el combustible es el gas de síntesis, se encuentran alrededor del 5,5 [%]. Por su parte, los errores que presentan los resultados computacionales respecto a los experimentales, en la PI, la IMEP, el ISFC y la eficiencia térmica indicada, para los casos de referencia en que el motor es alimentado con

gasolina, siempre son cercanos al 1 [%]. Basándose en la validación del modelo desarrollado, se concluye que en el caso C3 los parámetros indicados computacionales son peores a los experimentales, esto indica que los resultados reportados en este trabajo para la optimización a 4500 [RPM] pueden estar infravalorados. Lo que teóricamente llevaría a suponer que realmente se tendrían más individuos que superan con mayor diferencia los valores de eficiencia térmica indicada respecto al caso de referencia C4. No obstante, para el caso C1 las diferencias cercanas al 5,5 [%], entre lo reportado en [8] y lo simulado, se dan de forma inversa a lo discutido para el caso C3, por lo cual los resultados de la optimización a 2500 [RPM] estarían sobrevalorados. Estas conclusiones pueden corroborarse observando las comparaciones realizadas respecto a los casos de referencia, C1 vs C2 y C3 vs C4.

Algunos aportes adicionales de este trabajo se mencionan a continuación. Para llevar a cabo esta investigación fue necesario desarrollar una nueva metodología de enmallado aplicable para KIVA-4. Esto se debe a que actualmente las herramientas de mallado disponibles para este software cuentan con la posibilidad de desarrollar mallas para motores con válvulas, o de pistones con cuenco, pero no es posible desarrollar mallas para motores que tengan ambas características [85]. La metodología de malla desarrollada en este trabajo soluciona este problema, permitiendo la discretización espacial de motores más reales con geometrías complejas. Esta metodología se puede consultar a detalle en el estudio postulado en [85].

Por otro lado, en el transcurso de la investigación se desarrolló un estudio que permitió evaluar el desempeño que tienen diferentes mecanismos semidetallados a la hora de simular la combustión de gases de síntesis bajo diferentes condiciones de presión, temperatura, relación de equivalencia y composición del gas. Como resultado principal de dicha investigación se encuentra que globalmente el mecanismo GRI 3.0 es el que realiza las mejores predicciones. Este estudio fue publicado y se puede consultar con profundidad en la referencia [64].

Finalmente para el desarrollo de los casos de optimización fue necesario adaptar una subrutina de acople entre KIVA y el algoritmo NSGA II, obteniendo una herramienta funcional para la optimización de motores en ciclo abierto. Además, en esta nueva versión del código de acople se encuentran varias mejoras realizadas durante este trabajo. Dichas mejoras permiten monitorear de manera más precisa las simulaciones, tener lecturas de

los archivos de entrada y salida de KIVA en diferentes momentos de la simulación de forma más confiable y rápida, incorporar el cálculo de nuevos parámetros de combustión y disminuir la memoria demandada por cada caso de optimización.

## 6.2 Recomendaciones

La implementación de mallas móviles para la simulación de fenómenos que involucran dinámica de fluidos y combustión generalmente trae dificultades consigo. En KIVA por ejemplo, para el ajuste de la relación de compresión se sugiere modificar la distancia entre el pistón y la culata en el PMS, a esta distancia se le conoce como *squish* [46, 47, 48, 49]. No obstante, cuando la relación de compresión es muy grande o se tienen cuencos o pre cámaras de combustión, el *squish* debe tomar valores muy pequeños para que el motor tenga una relación de compresión acorde con la realidad. Con base en esto, en KIVA ha persistido el problema que al tener esta distancia con valores tan bajos, la malla no es capaz de regenerarse en momentos cercanos al PMS, causando que las simulaciones fallen. Esta es la razón por la cual en este trabajo tuvo que ajustarse la carrera del pistón en vez del *squish*, requiriendo el acople adicional de los tiempos de válvulas y ocasionado que el modelo desarrollado tuviera un volumen de desplazamiento mayor al motor real. Por esta razón para trabajos futuros se recomienda dar solución a este problema, mejorando los algoritmos que permiten los movimientos de la malla en KIVA.

Por otro lado se recomienda repetir los procesos de optimización utilizando esta vez más generaciones o más individuos por generación. Con esta práctica se espera que todos los individuos de la última generación se encuentren distribuidos en el frente de Pareto, y además, que las regiones que en las optimizaciones realizadas en este trabajo se encuentran sin explorar, sean estudiadas con mayor profundidad [17, 80, 81]. De esta forma, se espera obtener mayor cantidad y mejores resultados para el análisis de la operación del motor con gases de síntesis.

También es recomendable realizar optimizaciones en las cuales el gas de síntesis sea utilizado como un aditivo a la gasolina. Con esto, el principal objetivo es encontrar las concentraciones óptimas de gas de síntesis en la mezcla de combustibles, y posteriormente las relaciones de equivalencia adecuadas para dichas mezclas.

Siguiendo, se recomienda optimizar utilizando cinética elemental semidetallada, ya que teóricamente se tendrían mejores predicciones para las emisiones contaminantes que

deseen estudiarse, y permitiría la optimización de la composición del combustible [17, 26, 35, 38].

Como se observó durante el desarrollo de la investigación, el recurso computacional es un factor crítico en la optimización de motores de combustión interna. Por esta razón es recomendable que a futuro en los análisis de convergencia de malla se incluya el costo computacional que acarrea cada una de las mallas evaluadas, evidenciando el crecimiento en el tiempo de simulación del MCI a medida que aumenta el número de celdas en el dominio. Con esta información será posible seleccionar para la optimización del motor una malla más adecuada a la capacidad de cómputo disponible.

Finalmente, observando los resultados de las optimizaciones realizadas, se concluye que tanto a 2500 [RPM] como a 4500 [RPM], la eficiencia térmica indicada, la PI, la IMEP, el ISFC y las emisiones contaminantes de CO, NO y CO<sub>2</sub>, son funciones de la relación de equivalencia en la cámara de combustión. Por esta razón, en trabajos futuros es posible construir modelos fenomenológicos a partir de métodos de regresión, o entrenar redes neuronales, basándose en los resultados de las simulaciones realizadas [17]. Estas herramientas permitirán la obtención de resultados rápidos, sin la necesidad de llevar a cabo simulaciones del motor. Estas son prácticas muy recomendables para la reducción del costo computacional, ya que permitirán implementar optimizaciones con gran cantidad de individuos y generaciones, sin requerir capacidades de cómputo muy elevadas [17].

## Referencias bibliográficas

- [1]. Nuno Afonso Moreira, Eliseu Monteiro, Julien Sotton, Marc Bellenoue, and Salvador Malheiro (2011). *Experimental study of syngas combustion at engine-like conditions in a rapid compression machine*. Elsevier, Experimental Thermal and Fluid Science, 35, 1473–1479.
- [2]. Emilio Cerdá. *Energía obtenida a partir de biomasa*. Universidad Complutense de Madrid.
- [3]. Rubenildo V. Juan Daniel Martínez, Khamid Mahkamov, Andrade and Electo E. Silva Lora (2012). *Syngas production in downdraft biomass gasifiers and its application using internal combustion engines*. Elsevier, Renewable Energy, 38, 1-9.
- [4]. Tinaut, Francisco V. Andres Melgar, Alfonso Horrillo and Ana Diez de la Rosa (2006). *Method for predicting the performance of an internal combustion engine fuelled by producer gas and other low heating value gases*. Elsevier, Fuel Processing Technology, 87, 135–142.
- [5]. Tsiakmakis Stefanos, Dimitrios Mertzis, Athanasios Dimaratos, Zisimos Toumasatos and Zissis Samaras (2014). *Experimental study of combustion in a spark ignition engine operating with producer gas from various biomass feedstocks*. Elsevier, Fuel, 122, 126–139.
- [6]. H. Gossler and O. Deutschmann (2015). *Numerical optimization and reaction flow analysis of syngas production via partial oxidation of natural gas in internal combustion engines*. Elsevier, international journal of hydrogen energy, 40 (2015), 11046-11058.
- [7]. M. Fischer, X. Jiang (2014). *An assessment of chemical kinetics for bio-syngas combustion*. Elsevier, Fuel, 137, 293–305.
- [8]. J. Arroyo, F. Moreno, M. Muñoz, C. Monné and N. Bernal (2014). *Combustion behavior of a spark ignition engine fueled with synthetic gases derived from biogas*. Elsevier, Fuel, 117, 50–58.
- [9]. F. Zhang, R. Yu and X.S. Bai (2012). *Detailed numerical simulation of syngas combustion under partially premixed combustion engine conditions*. Elsevier, international journal of hydrogen energy, 37, 17285-17293.
- [10]. Ronney Arismel Mancebo Boloya, Jose Luz Silveira, Celso Eduardo Tuna, Christian R. Coronado and Julio Santana Antunes (2011). *Ecological impacts from syngas burning in internal combustion engine: Technical and economic aspects*. Elsevier, Renewable and Sustainable Energy Reviews, 15, 5194– 5201.
- [11]. S. Bruscaa, V.Chiodo, A. Galvagno, R. Lanzafame and A. Marino Cugno Garrano (2014). *Analysis of reforming gas combustion in Internal Combustion Engine*. Energy Procedia, 45, 899-908.

- [12]. Subir Bhaduri, Benjamin Berger, Maxime Pochet, Hervé Jeanmart and Francesco Contino (2017). *HCCI engine operated with unscrubbed biomass syngas*. Elsevier, Fuel Processing Technology, 157, 52–58.
- [13]. Sona Visakhmoorthy, Tommy Tzanetakis, Dale Haggith, Andrzej Sobiesiak and John Z. Wen (2012). *Numerical study of a homogeneous charge compression ignition (HCCI) engine fueled with biogas*. Elsevier, Applied Energy, 92, 437–446.
- [14]. Grzegorz Przybyla, Andrzej Szlek, Dale Haggith and Andrzej Sobiesiak (2016). *Fuelling of spark ignition and homogenous charge compression ignition engines with low calorific value producer gas*. Elsevier, Energy, 116, 1464–1478.
- [15]. Hyoseok Cha, Taejun Eom, Soonho Song and Kwang Min Chun (2015). *An experimental study on the fuel conversion efficiency and NOx emissions of a spark-ignition gas engine for power generation by fuel mixture of methane and model syngas (H<sub>2</sub>/CO)*. Elsevier, Journal of Natural Gas Science and Engineering, 23, 517–523.
- [16]. Carlo Alberto Rinaldini, Giulio Allesina, Simone Pedrazzi, Enrico Mattarelli, Tommaso Savioli, Nicolò Morselli, Marco Puglia and Paolo Tartarini (2017). *Experimental investigation on a Common Rail Diesel engine partially fuelled by syngas*. Elsevier, Energy Conversion and Management, 138, 526–537.
- [17]. Yu Shi, Hai-Wen Ge and Rolf D. Reitz (2011). *Computational Optimization of Internal Combustion Engines*. Springer, Springer London Dordrecht Heidelberg New York, ISBN 978-0-85729-618-4.
- [18]. G. Aloisio, E. Blasi, M. Cafaro, I. Epicoco, S. Fiore, and S. Mocavero (2004). *A Grid Environment for Diesel Engine Chamber Optimization*. Elsevier, Parallel Computing: Software Technology, Algorithms, Architectures and Applications.
- [19]. Sung Wook Park (2012). *Optimization of combustion chamber geometry and engine operating conditions for compression ignition engines fueled with dimethyl ether*. Elsevier, Fuel, 97, 61–71.
- [20]. Sung Wook Park (2010). *Optimization of combustion chamber geometry for stoichiometric diesel combustion using a micro genetic algorithm*. Elsevier, Fuel Processing Technology, 91, 1742–1752.
- [21]. Jie Liu, Junle Wang, Hongbo Zhao (2018). *Optimization of the injection parameters and combustion chamber geometries of a diesel/natural gas RCCI engine*. Elsevier, Energy, 164, 837–852.
- [22]. Seungpil Lee, Sung Wook Park (2017). *Optimization of the piston bowl geometry and the operating conditions of a gasoline-diesel dual-fuel engine based on a compression ignition engine*. Elsevier, Energy, 121, 433–448.
- [23]. P.K. Senecal, E. Pmrning, K.J. Richards (2002). *Multi-mode genetic algorithm optimization of combustion chamber geometry for low emissions*. SAE Technical Paper, 2002-01-0958.
- [24]. D.D. Wickman, P.K. Senecal, R.D. Reitz (2001). *Diesel engine combustion chamber geometry optimization using genetic algorithms, multi-dimensional spray, and combustion modeling*. SAE Technical Paper, 2001-01-0547.
- [25]. S.W. Park, R.D. Reitz (2009). *Optimization of fuel/air mixture formation for stoichiometric diesel combustion using 2-spray-angle group-hole nozzle*. Elsevier, Fuel, 88, 843–852.

- [26]. Zhen Xu, Ming Jia, Yaopeng Li, Yachao Chang, Guangfu Xu, Leilei Xu, Xingcai Lu (2018). *Computational optimization of fuel supply, syngas composition, and intake conditions for a syngas/diesel RCCI engine*. Elsevier, Fuel, 234, 120–134.
- [27]. Boehman AL, Corre OL (2008). *Combustion of syngas in internal combustion engines*. Combust Sci Technol, 180(6), 1193–206.
- [28]. Sujith Sukumaran, Song-Charnng Kong (2013). *Modeling fuel NO<sub>x</sub> formation from combustion of biomass-derived producer gas in a large-scale burner*. Elsevier, Combustion and Flame, 160, 2159–2168.
- [29]. Zhihua Wang, Yajun Zhou, Ronald Whiddon, Yong He, Kefa Cen, Zhongshan Li. (2016). *Investigation of NO formation in premixed adiabatic laminar flames of H<sub>2</sub>/CO syngas and air by saturated laser-induced fluorescence and kinetic modeling*. Elsevier, Combustion and Flame, 164, 283–293.
- [30]. Magin Lapuerta, Josep Sanz-Argent, Robert Raine (2014). *Heat release determination in a constant volume combustion chamber from the instantaneous cylinder pressure*. Elsevier, Applied Thermal Engineering, 63, 520-527.
- [31]. Ulugbek Azimov, Masahiro Okuno, Kazuya Tsuboi, Nobuyuki Kawahara, Eiji Tomita (2011). *Multidimensional CFD simulation of syngas combustion in a micro-pilot-ignited dual-fuel engine using a constructed chemical kinetics mechanism*. Elsevier, international journal of hydrogen energy, 36, 13793-13807.
- [32]. Carlos Arrieta, Andrés Amell, Layrisser Iral, Ángel Valencia y Arley Cardona (2014). *Análisis de la combustión de metano y una mezcla equimolar metano-syngas en un quemador de combustión estabilizada en la superficie: eficiencia y emisiones contaminantes*. Ingenius.
- [33]. Hugo J. Burbano, Jhon Pareja, Andres A. Amell. (2011). *Laminar burning velocities and flame stability analysis of syngas mixtures at sub-atmospheric pressures*. Elsevier, international journal of hydrogen energy, 36, 3243-3252.
- [34]. Andres A. Amell, Hernando A. Yepes, Francisco J. Cadavid (2014). *Numerical and experimental study on laminar burning velocity of syngas produced from biomass gasification in sub-atmospheric pressures*. Elsevier, international journal of hydrogen energy, 39, 8797-8802.
- [35]. Turns S. (2000). *An introduction to combustion*. Second edition. USA, Mc Graw Hill.
- [36]. Khizer Saeed (2016). *Modelling of oxide of nitrogen formation in a lean burn premixed charge stirred chemical reactor based engines*. Elsevier, Journal of the Energy Institute, 89, 513-524.
- [37]. R. Raine, C. R. Stone, J. Gould (1995). *Modeling of Nitric Oxide Formation in Spark Ignition Engines with a Multizone Burned Gas*. Elsevier, Combustion and flame, 102, 241-255.
- [38]. Heywood, .I. B., *Internal Combustion Engine Fundamentals*, McGraw-Hill, New York, 1988.
- [39]. Willard W. Pulkrabek. *Engineering Fundamentals of the Internal Combustion Engine*. Prentice Hall, Upper Saddle River, New Jersey, 07458.
- [40]. R. Stone. *Introduction to Internal Combustion Engines*. Second edition, Macmillan.
- [41]. C. F. Forigua & J. M. Mantilla (2016). *Modelo de combustión de motores de encendido por chispa acoplado Cantera a KIVA 4*. Boletín de Matemáticas 23(1) 35-69.

- [42]. C. F. Forigua (2015). *Desarrollo software de un módulo de cinética química en fase gaseosa para simulación 3D de motores de combustión interna* (Tesis de Maestría en Ingeniería Mecánica). Universidad Nacional de Colombia, Bogotá, Colombia.
- [43]. Forigua Rodriguez, C. and Mantilla, J. (2015). *Modeling HCCI Engine Combustion Coupling Cantera to KIVA 4*. SAE Technical Paper 2015-01-0816.
- [44]. Amsden, A. A. *KIVA-3: A KIVA program with blockstructured mesh for complex geometries*, Technical report No. LA-12503-MS, Los Alamos National Laboratory, March 1993.
- [45]. Amsden, A. A., *KIVA-3V: A block structured KIVA program for engines with vertical or canted valves*, Technical report No. LA-13313-MS, Los Alamos National Laboratory, July 1997.
- [46]. Amsden, A. A., *KIVA-2: A Computer Program for Chemically Reactive Flows with Sprays*. Technical report, Los Alamos National Laboratory, May 1989.
- [47]. M. J. Holst. *Notes on the KIVA-2 software and chemically reactive fluid mechanics*, Numerical Mathematics Group Computing & Mathematics Research Division Lawrence Livermore National Laboratory, 1992.
- [48]. Amsden, A. A., *KIVA-3V, release 2, improvements to KIVA-3V*, Technical report No. LA-UR-99-915, Los Alamos National Laboratory, 1999.
- [49]. Torres, D. J., *KIVA-4 manual*, LA report No. LAUR-07-2007, Los Alamos National Laboratory, 2007.
- [50]. Torres, D. J., and Trujillo, M. F. (2006). *KIVA-4: An unstructured ALE code for compressible gas flow with sprays*. Journal of Computational Physics. 219, 943-975.
- [51]. H. M. David Goodwin, Nicholas Malaya and R. Speth. *Cantera: An object-oriented software toolkit for chemical kinetics, thermodynamics, and transport processes*. ver. 2.1.1." Software repository, 3 2014.
- [52]. H. M. David Goodwin, Nicholas Malaya and R. Speth. *Cantera 2.1.1 documentation*. Web page, 3 2014.
- [53]. C. Reid, *Cantera structure*, 5 2015.
- [54]. Ferziger, Joel H., y PERIC, Milovan (2002). *Computational Methods for Fluid Dynamics*. Springer.
- [55]. Anderson, John D (1995). *Computational Fluid Dynamics, the Basics with Applications*. McGraw Hill, Inc.
- [56]. A. Amsden, T. Butler, P. O'Rourke, and J. Ramshaw (1985). *Kiva-a comprehensive mode, for 2-d and 3-d engine simulations*. tech. rep. SAE Technical Paper.
- [57]. V. Yakhot and S. Orszag (1986). *Renormalization group analysis of turbulence, basic theory*. Journal of Scientific Computing, vol. 1, 3-51.
- [58]. V. Yakhot and L. M. Smith (1992). *The renormalization group, the e-expansion and derivation of turbulence models*. Journal of Scientific Computing, vol. 7, 35-61.
- [59]. S. Descombes, T. Dumont, V. Louvet and M. Massot. *Numerical analysis of operator splitting techniques for the numerical simulation of reaction waves with multiple scales*. 11th International Conference on Numerical Combustion.
- [60]. Marlis Hochbruck, Dusseldorf and Alexander Ostermann, Innsbruck (2005). *Time integration: splitting methods*. CIP 2005, Helsinki.
- [61]. M. A. SINGER, S. B. POPE and H. N. NAJM (April 2006). *Operator splitting with ISAT to model reacting flow with detailed chemistry*. Combustion Theory and Modelling Vol. 10, No. 2, 199-217.



- [62]. F. Perini, G. Cantore, and R. Reitz (2011). *An analysis on time scale separation for engine simulations with detailed chemistry*. tech. rep., SAE Technical Paper, 2011.
- [63]. Hiew Mun Poon, Kar Mun Pang, Hoon Kiat Ng, Suyin Gan, Jesper Schramm (2016). *Development of multi-component diesel surrogate fuel models – Part II: Validation of the integrated mechanisms in 0-D kinetic and 2-D CFD spray combustion simulations*. Elsevier, Fuel, 181, 120–130.
- [64]. Pérez Gordillo D. S., Mantilla González J. M. (2017). *Evaluación de mecanismos de reacción para la combustión de gases de síntesis derivados de biomasa*. Memorias Encuentro de Investigadores 2017 – Facultad de Ingeniería Universidad Nacional de Colombia Sede Bogotá.
- [65]. F.H.V. Coppens, J. De Ruyck, A.A. Konnov (2007). *The effects of composition on burning velocity and nitric oxide formation in laminar premixed flames of  $\text{CH}_4 + \text{H}_2 + \text{O}_2 + \text{N}_2$* . Combust. Flame, 149, 409–417.
- [66]. G.P. Smith, D.M. Golden, M. Frenklach, N.W. Moriarty, B. Eiteneer, M. Goldenberg, C.T. Bowman, R.K. Hanson, S. Song, W.C. Gardiner, V.V. Lissianski, Z. Qin, *GRI 3.0 Mechanism*. [http://www.me.berkeley.edu/gri\\_mech/](http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/) [website].
- [67]. Kazakov A, Frenklach M. *DRM mechanism*. <http://www.me.berkeley.edu/drm/> [website].
- [68]. Heghes C. *Soot formation modeling during hydrocarbon pyrolysis and oxidation behind shock waves*. Ph.D. thesis, University of Heidelberg; 2006.
- [69]. A. Frassoldati, T. Faravelli, E. Ranzi. (2007). *The ignition, combustion and flame structure of carbon monoxide/hydrogen mixtures. Note 1: Detailed kinetic modeling of syngas combustion also in presence of nitrogen compounds*. Elsevier, International Journal of Hydrogen Energy, 32, 3471–3485.
- [70]. Westbrook, Charles K. Oliver herbinet Henry J. Curran Emma J. S (2008). *A comprehensive detailed chemical kinetic reaction mechanism for combustion of n-alkane hydrocarbons from n-octane to n-hexadecane*. Elsevier, Combustion and flame, Nr. 10.1080/13647830.2013.872807.
- [71]. Westbrook, Charles K. Pitz, William J. Westmoreland, Phillip R. Dryer, Fred L. Chaos, M. Obwald, Patrick, Kohse-Höinghaus, Katharina, Cool, Terrill A. Wang, Juan, Yang (2009). *A detailed chemical kinetic reaction mechanism for oxidation of four small alkyl esters in laminar premixed flames*. Proceedings of the combustion institute, 32, 221–228.
- [72]. H. L. Nguyen and S. Ying (1990). *Critical Evaluation of Jet-A Spray Combustion Using Propane Chemical Kinetics in Gas Turbine Combustion Simulated by KIVA-II*. 26th Joint Propulsion Conference cosponsored by the AIAA, SAE, ASME, and ASEE Orlando, Florida, July 16-18, 1990.
- [73]. B. Franzelli, E. Riber, L.Y.M. Giquel a and T. Poinso (2011). *Large-Eddy Simulation of combustion instabilities in a lean partially premixed swirled flame*. Preprint submitted to Elsevier.
- [74]. Zhang Y and Liu Y (2017) *Numerical Simulation of Hydrogen Combustion: Global Reaction Model and Validation*. Front. Energy Res. 5:31. doi: 10.3389/fenrg.2017.00031.
- [75]. A. Abou-Taouk, I. R. Sigfrid, R. Whiddon and L. E. Eriksson (2011). *A Four-Step Global Reaction Mechanism for CFD Simulations of Flexi-Fuel Burner for Gas Turbines*. Turbulence, Heat and Mass Transfer, Vol 7.

- [76]. A. Abou-Taouk and L. E. Eriksson (2011). *Evaluation of Optimized 3-step Global Reaction Mechanism for CFD Simulations on Sandia Flame D*. Numerical Analysis and Applied Mathematics ICNAAM.
- [77]. Pierre Boivin (2011). *Reduced-Kinetic Mechanisms for Hydrogen and Syngas Combustion Including Autoignition (Tesis Doctoral)*. Departamento de Ingeniería Térmica y de fluidos, Escuela Politécnica Superior.
- [78]. Steven C. Chapra and Raymond P. Canale (2006). *Métodos Numéricos Para Ingenieros*. Quinta edición. The McGraw-Hill Companies, Inc. All rights reserved.
- [79]. David E. Goldberg (1989). *Genetic Algorithms for Search, Optimization, and Machine Learning*. Addison-Wesley Professional, first edition.
- [80]. Kalyanmoy Deb, Associate Member, IEEE, Amrit Pratap, Sameer Agarwal, and T. Meyarivan (2002). *A Fast and Elitist Multiobjective Genetic Algorithm: NSGA-II*. IEEE Transactions on Evolutionary Computation, Vol. 6, No. 2.
- [81]. N. Srinivas and Kalyanmoy Deb. *Multiobjective Optimization Using Nondominated Sorting in Genetic Algorithms*. *Evolutionary Computation*, Vol. 2, No.3, pg 221-248.
- [82]. G.M. Kosmadakis, D.C. Rakopoulos and C.D. Rakopoulos (2015). *Investigation of nitric oxide emission mechanisms in a SI engine fueled with methane/hydrogen blends using a research CFD code*. Elsevier, international journal of hydrogen energy, 40, 15088-15104.
- [83]. J. Arroyo. Comunicación personal vía e-mail. 22 de junio de 2017.
- [84]. G.M. Kosmadakis. Comunicación personal vía e-mail. 8 de julio de 2017.
- [85]. Barrera Soto C. A., Pérez Gordillo D. S., Forigua C. and Mantilla González J. M. *Alternative mesh generation for KIVA-4*. Artículo en preparación y corrección.
- [86]. Michele Battistoni, Francesco Mariani, Francesco Risi, Claudio Poggiani (2015). *Combustion CFD modeling of a spark ignited optical access engine fueled with gasoline and ethanol*. Elsevier, Energy Procedia, 82, 424-431.
- [87]. Pomraning, E., Richards, K., and Senecal, P (2014). *Modeling Turbulent Combustion Using a RANS Model, Detailed Chemistry, and Adaptive Mesh Refinement*. SAE Technical Paper 2014-01-1116.
- [88]. Senecal, P., Pomraning, E., Richards, K., and Som, S (2013). *An Investigation of Grid Convergence for Spray Simulations using an LES Turbulence Model*. SAE Technical Paper 2013-01-1083.
- [89]. D.O. Mora and J.M. Mantilla (2017). *Estudio del proceso de combustión en un motor de alto swirl empleando mecánica de fluidos computacional*. Elsevier España, Revista Internacional de Métodos Numéricos para Cálculo y Diseño en Ingeniería, 33, 212–224.
- [90]. ERC's Page of FAQ's. [http://homepages.cae.wisc.edu/~hessel/faqs/index\\_faq.htm](http://homepages.cae.wisc.edu/~hessel/faqs/index_faq.htm).
- [91]. Lombardini a Kohler Company. Datasheet Lombardini LGW-523-MPI engine. Cod. 3558223-11-2008.
- [92]. Lombardini a Kohler Company. Manual de taller motor Lombardini LGW-523-MPI. Cod. 1.5302.790.
- [93]. Nicolas Bouvet, Christian Chauveau, Iskender Gokalp and Fabien Halter (2011). *Experimental studies of the fundamental flame speeds of syngas (H<sub>2</sub>/CO)/air mixtures*. Elsevier, Proceedings of the Combustion Institute, 33, 913–920.

# Anexo A. Modelos CFD utilizados en KIVA-UN y mecanismos de reacción

## A.1 Ecuaciones gobernantes

Las ecuaciones de conservación para los fluidos, pueden ser formuladas desde dos enfoques diferentes, el enfoque Euleriano, donde se tiene al observador estático (Volumen de Control), y el enfoque Lagrangiano, donde el observador se mueve con el fluido (Masa de Control) [54, 55]. En esta sección se formularan las ecuaciones de Navier-Stokes en su forma diferencial conservativa (las cuales se resuelven usando esquemas Eulerianos), y en su forma integral no conservativa (las cuales se resuelven usando esquemas Lagrangianos) [54]. Finalmente es necesario anotar que las cantidades vectoriales se representan en negrilla  $\mathbf{A}$ , y las matrices y tensores en negrilla con una línea en la parte superior  $\bar{\mathbf{T}}$ .

### ▪ Conservación de masa

KIVA resuelve fluidos multicomponente y reactivos, por lo que la conservación de masa en el dominio de interés, cumple la siguiente ecuación [42, 46, 47].

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = \dot{\rho}^s \quad (41)$$

Donde el primer término de la ecuación representa la acumulación de masa (derivada temporal de la variable de interés), el segundo es el termino convectivo, y el tercero  $\dot{\rho}^s$ , representa la fuente de masa debido a la evaporación del chorro de combustible, proveniente del modelo de inyección [47]. La ecuación (41) es la forma diferencial conservativa de la conservación de masa en KIVA, la siguiente ecuación es la forma integral no conservativa [50].

$$\frac{D}{Dt} \int \rho \, dV = \int \dot{\rho}^s \, dV \quad (42)$$

### ▪ Conservación de especies

La ecuación de conservación de masa de la especie “m”, usada en KIVA, en su forma diferencial conservativa, es la siguiente [42, 46, 47].

$$\frac{\partial \rho_m}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_m \mathbf{u}) = \nabla \cdot \left[ \rho D \nabla \left( \frac{\rho_m}{\rho} \right) \right] + \dot{\rho}_m^c + \rho^s \delta_{mj} \quad (43)$$

Donde el primer término de la derecha es la acumulación de masa de la especie “m”, el segundo es el termino convectivo, el primer término de la izquierda representa el transporte difusivo y es modelado por la ley de Fick con un único coeficiente binario  $D$  [35, 46],  $\dot{\rho}_m^c$  es el termino fuente que corresponde a la tasa de cambio de la masa de la especie “m” debido a las reacciones químicas y  $\rho^s \delta_{mj}$  es la fuente de masa debida a la evaporación del chorro de combustible inyectado. En esta última expresión  $\delta_{mj}$  es el delta de Kronecker, y el subíndice “j” corresponde a la especie que se está evaporando, entonces este término es nulo excepto para las especies que componen el combustible inyectado [50]. Finalmente la ecuación de conservación de masa de la especie “m”, usada en KIVA, en su forma integral no conservativa, es la siguiente [50].

$$\frac{D}{Dt} \int \rho_m dV = \int \left[ \rho D \nabla \left( \frac{\rho_m}{\rho} \right) \right] dA + \int \dot{\rho}_m^c dV + \int \dot{\rho}_m^s dV \quad (44)$$

### ▪ Conservación de momento

En KIVA la conservación de momento es modelada por la siguiente ecuación, la cual se encuentra en su forma diferencial conservativa [42, 46, 47].

$$\frac{\partial (\rho \mathbf{u})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{u}) = \nabla \cdot (\bar{\mathbf{T}}) + \rho \mathbf{g} + \mathbf{F}^s \quad (45)$$

Donde el primer término de la derecha representa la acumulación de cantidad de movimiento, el segundo es el termino convectivo, el primer término de la izquierda representa el transporte difusivo y los dos últimos términos de la izquierda son términos fuente. El tensor que modela la deformación superficial es  $\bar{\mathbf{T}}$ ,  $\mathbf{g}$  es la aceleración gravitacional y  $\mathbf{F}^s$  es la tasa de ganancia de momento por unidad de volumen, debido al chorro de combustible [46]. Si se supone que se tiene un fluido Newtoniano,  $\bar{\mathbf{T}}$  esta descrito por el tensor de esfuerzos viscosos para fluidos Newtonianos, entonces la ecuación (45) se transforma de la siguiente manera [47, 50].

$$\frac{\partial (\rho \mathbf{u})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{u}) = \nabla \cdot (\bar{\boldsymbol{\sigma}}) - \nabla p + \rho \mathbf{g} + \mathbf{F}^s \quad (46)$$

Donde:

$$\bar{\mathbf{T}} = -p\bar{\mathbf{I}} + \bar{\boldsymbol{\sigma}} \quad (47)$$

Donde  $\bar{\mathbf{I}}$  es el tensor unitario y  $\bar{\boldsymbol{\sigma}}$  es el tensor de esfuerzo cortante viscoso [42, 50].

$$\bar{\boldsymbol{\sigma}} = 2\mu \text{def } \mathbf{u} + \lambda \nabla \cdot (\mathbf{u}\bar{\mathbf{I}}) = \mu[\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T] + \lambda(\nabla \cdot \mathbf{u})\bar{\mathbf{I}} \quad (48)$$

Donde  $\mu$  es la viscosidad dinámica o primer coeficiente de viscosidad,  $\lambda$  es el segundo y normalmente tiene un valor de  $\left(-\frac{2}{3}\right)\mu$ ; y el operador “def” se define como.

$$\text{def } \mathbf{u} = \frac{1}{2}[\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T] \quad (49)$$

El flujo dentro de un motor es turbulento, por lo que se deben incluir modelos adicionales que alteran la ecuación general de conservación momento, con el objetivo de poder tener soluciones de la misma [46, 47]. KIVA emplea el modelo de turbulencia de las ecuaciones de Navier-Stokes promediadas de Reynolds (RANS), de la familia RANS más específicamente KIVA emplea un modelo RNG k- $\epsilon$  modificado, de este modelo se derivan las ecuaciones para solucionar las escalas más pequeñas de la turbulencia, y por medio de estas se llega a la ecuación general que es la que resuelve KIVA [42, 46].

$$\frac{\partial(\rho \mathbf{u})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{u}) = \nabla \cdot (\bar{\boldsymbol{\sigma}}) - \frac{1}{\alpha^2} \nabla p + \rho \mathbf{g} + \mathbf{F}^s - A_0 \nabla \left( \frac{2}{3} \rho k \right) \quad (50)$$

Donde el término  $\frac{1}{\alpha^2} \nabla p$  se conoce como el método de escalado del gradiente de presión [47],  $A_0$  activa o desactiva el acople de las ecuaciones de turbulencia correspondiente al término  $A_0 \nabla \left( \frac{2}{3} \rho k \right)$  [42]. Esta última expresión representa el transporte de momento debido a las fluctuaciones turbulentas. Entonces si  $A_0 = 0$  y  $\alpha = 1$  se obtendrán las ecuaciones para el caso laminar [46, 47]. Por otro lado el término  $k$  corresponde a la energía cinética turbulenta. Finalmente la conservación de momento en su forma integral no conservativa es [50].

$$\frac{D}{Dt} \int \rho \mathbf{u} dV = - \int \left[ \frac{1}{\alpha^2} p + A_0 \left( \frac{2}{3} \rho k \right) \right] dA + \int \bar{\boldsymbol{\sigma}} dA + \int \rho \mathbf{g} dV + \int \mathbf{F}^s dV \quad (51)$$

#### ▪ Método de escalado del gradiente de presión

El PGS tiene por objetivo escalar el gradiente de presión en flujos subsónicos, para así aumentar la eficiencia computacional de flujos con bajos números de Mach, sin modificar características de interés en la solución [46]. El método consiste en multiplicar el gradiente de presión por el factor escalar  $\frac{1}{\alpha^2}$  [46]. El valor  $\alpha$  es constante en el espacio pero puede variar con el tiempo, se conoce como parámetro PGS y siempre debe tener un valor mayor

o igual a uno [46]. PGS es aplicable cuando las fluctuaciones de presión tienen un valor relativamente pequeño, en comparación con la presión promedio del sistema [42, 56]. En la mayoría de los casos el cociente entre la fluctuación de presión y la presión promedio es igual a Mach al cuadrado, de esta forma, este método aumenta el valor de Mach en un factor de  $\alpha$  [46]. Esto se traduce en una reducción de la velocidad del sonido y por ende del número de Courant, al dividirlos en  $\alpha$ , lo que causa el incremento en la eficiencia computacional [46]. Este método es utilizable en aplicaciones donde la precisión en la solución de las ondas acústicas no es importante [56].

#### ▪ Modelo de turbulencia RNG k- $\epsilon$ .

El modelo RNG fue desarrollado para normalizar las ecuaciones de Navier-Stokes, y así tener en cuenta los efectos de escalas de la turbulencia más pequeñas [57, 58]. En el modelo k- $\epsilon$  estándar, la viscosidad turbulenta se determina a partir de una sola escala de longitud turbulenta, por lo que la difusión turbulenta calculada depende solo de la producida en la escala especificada, mientras que en realidad todas las escalas de movimiento contribuirán a la difusión turbulenta [58]. Este modelo es el más empleado en la simulación estándar de MCI, debido que captura el efecto que tiene el *swirl* en la turbulencia [89].

El enfoque RNG, básicamente consiste en una técnica matemática [57], aplicable para obtener un modelo de turbulencia similar al k- $\epsilon$ , entregando como resultado una forma modificada de la ecuación de  $\epsilon$  que intenta explicar las diferentes escalas de movimiento a través de cambios en el término de producción [58]. Entonces, las ecuaciones para  $k$ , y para la disipación de  $k$ ,  $\epsilon$ , las cuales rigen éste modelo son las siguientes [42, 58].

$$\frac{\partial(\rho k)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} k) = \frac{2}{3} \rho k \nabla \cdot \mathbf{u} + \bar{\sigma} : \nabla \mathbf{u} + \nabla \cdot \left[ \left( \frac{\nu}{P_{rk}} \right) \nabla k \right] - \rho \epsilon + \dot{W}^s \quad (52)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho \epsilon)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \epsilon) &= - \left( \frac{2}{3} c_{\epsilon 1} - c_{\epsilon 3} \right) \rho \epsilon \nabla \cdot \mathbf{u} + \nabla \cdot \left[ \left( \frac{\nu}{P_{re}} \right) \nabla \epsilon \right] + \frac{\epsilon}{k} (c_{\epsilon 1} \bar{\sigma} : \nabla \mathbf{u} - c_{\epsilon 2} \rho \epsilon + c_s \dot{W}^s) \end{aligned} \quad (53)$$

Las dos ecuaciones anteriores corresponden a las ecuaciones de la turbulencia en su forma diferencial conservativa. A continuación se presentan en su forma integral no conservativa [50].

$$\begin{aligned} \frac{D}{Dt} \int \rho k dV = & - \int \frac{2}{3} \rho k \nabla \cdot \mathbf{u} dV + \int \bar{\sigma} : \nabla \mathbf{u} dV + \int \left[ \left( \frac{\mu}{P_{rk}} \right) \nabla k \right] dA - \int \rho \epsilon dV \\ & + \int \dot{W}^s dV \end{aligned} \quad (54)$$

$$\begin{aligned} \frac{D}{Dt} \int \rho \epsilon dV = & - \int \left( \frac{2}{3} c_{\epsilon 1} - c_{\epsilon 3} \right) \rho \epsilon \nabla \cdot \mathbf{u} dV + \int \left[ \left( \frac{\mu}{P_{re}} \right) \nabla \epsilon \right] dA \\ & + \int \frac{\epsilon}{k} (c_{\epsilon 1} \bar{\sigma} : \nabla \mathbf{u} - c_{\epsilon 2} \rho \epsilon + c_s \dot{W}^s) dV \end{aligned} \quad (55)$$

Donde los valores  $c_i$ ,  $P_{rk}$  y  $P_{re}$  son constantes que se obtienen a partir de experimentos y consideraciones teóricas. Para las simulaciones realizadas en este trabajo estas constantes tienen los siguientes valores,  $c_{\epsilon 1} = 1,42$ ;  $c_{\epsilon 2} = 1,68$ ;  $c_{\epsilon 3} = -1,0$ ;  $c_s = 1,50$ ;  $P_{rk} = 0,72$  y  $P_{re} = 0,72$ . Finalmente,  $\dot{W}^s$  Corresponde al término fuente debido a las interacciones con el chorro de combustible.

#### ▪ Conservación de energía

KIVA estudia la evolución en el dominio espacial y temporal de la energía interna  $I$ , excluyendo la energía química [46]. Entonces, la energía total es dependiente de la velocidad del flujo y la energía interna según se muestra a continuación.

$$E = I + \frac{\mathbf{u}\mathbf{u}}{2} \quad (56)$$

De forma análoga a la conservación de momento, la turbulencia también influye en la ecuación de conservación de energía. KIVA resuelve el principio de conservación para la propiedad  $\rho I$  y añade términos fuente para modelar la influencia de la turbulencia [42, 46, 56]. Entonces la conservación de la energía en KIVA esta modelada por la siguiente ecuación (en su forma diferencial conservativa) [42, 56].

$$\frac{\partial(\rho I)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} I) = (1 - A_0) \bar{\sigma} : \nabla \mathbf{u} - p \nabla \cdot \mathbf{u} + \dot{Q}^c + \dot{Q}^s - \nabla \cdot \mathbf{J} + A_0 \rho \epsilon \quad (57)$$

Donde el primer término de la derecha corresponde a la acumulación de energía, el segundo es el termino convectivo, el primer término de la izquierda representa el transporte difusivo viscoso y los cuatro últimos términos de la izquierda son fuentes de energía. Entonces,  $\dot{Q}^c$  modela la tasa de liberación de calor por las reacciones químicas,  $\dot{Q}^s$  es la fuente de energía debida a las interacciones con el chorro de combustible y  $A_0 \rho \epsilon$  modela la influencia de la turbulencia en la ecuación de energía. Finalmente  $\mathbf{J}$  es la suma de las contribuciones debido a la difusión del calor y la entalpía, y se modela como sigue.

$$J = -K\nabla T - \rho D \sum h_m \nabla \left( \frac{\rho_m}{\rho} \right) \quad (58)$$

En la ecuación anterior se puede observar que la difusión de calor se modela con la ley de Fourier [35], y la difusión de entalpía con el término de transporte  $D\nabla h$  a partir de la ley de Fick [35, 38]. Finalmente la ecuación de conservación de energía usada en KIVA, en su forma integral no conservativa es [50].

$$\begin{aligned} \frac{D}{Dt} \int \rho I \, dV = & \int [(1 - A_0) \bar{\sigma} : \nabla \mathbf{u}] \, dV - \int p \nabla \cdot \mathbf{u} \, dV + \int \dot{Q}^c \, dV + \int \dot{Q}^s \, dV \\ & + \int \left[ K \nabla T + \rho D \sum h_m \nabla \left( \frac{\rho_m}{\rho} \right) \right] d\mathbf{A} + \int A_0 \rho \epsilon \, dV \end{aligned} \quad (59)$$

La ley de gases ideales completa el sistema de ecuaciones establecido por la conservación de masa, especies, momento y energía [42]. Por otro lado KIVA tiene un modelo desarrollado para el chorro de combustible, sin embargo éste, y los términos fuentes del mismo, solo se activan si se usa el sistema de inyección del software, que como se vio anteriormente no es el caso de éste trabajo.

### • Cinética química

En KIVA la cinética química se resuelve por la ecuación de Arrhenius, de donde provienen los términos fuentes  $\dot{\rho}_m^c$  y  $\dot{Q}^c$  [46]. De esta forma la fuente de masa para la ecuación de conservación de especies está dada por [46].

$$\dot{\rho}_m^c = W_m \sum_r (b_{mr} - a_{mr}) \dot{\omega}_r \quad (60)$$

Donde  $W_m$  es la masa molecular de la especie “m”,  $b_{mr}$  y  $a_{mr}$  son los coeficientes estequiométricos de la especie “m” en las reacciones que se encuentra a la izquierda  $a_{mr}$ , y en las que se encuentra a la derecha  $b_{mr}$ .  $\dot{\omega}_r$  Por su parte es la tasa a la que se da la reacción “r”, y está dada por la forma general de la ecuación de Arrhenius [46].

$$\dot{\omega}_r = A_{fr} T^{t_{fr}} e^{\left(-\frac{T_{fr}}{T}\right)} \prod_m \left( \frac{\rho_m}{W_m} \right)^{c_{mr}} - A_{br} T^{t_{br}} e^{\left(-\frac{T_{br}}{T}\right)} \prod_m \left( \frac{\rho_m}{W_m} \right)^{d_{mr}} \quad (61)$$

Donde los términos con el subíndice f corresponden para la reacción hacia adelante o de izquierda a derecha, y con el subíndice b para la reacción hacia atrás o de derecha a izquierda. Por otro lado  $c_{mr}$  y  $d_{mr}$  son los órdenes de reacción para la especie “m”, involucrada en la ecuación de Arrhenius de la reacción “r”, hacia adelante y hacia atrás respectivamente. Finalmente la liberación de energía debido a la reacción “r” está dada como sigue [46].



$$\dot{Q}^c = \sum_r \left( \dot{\omega}_r \sum_m (b_{mr} - a_{mr}) h_{fm}^0 \right) \quad (62)$$

Donde  $h_{fm}^0$  es la entalpía de formación de la especie “m” a la temperatura de referencia, en el caso de KIVA esta temperatura es el cero absoluto [46].

## A.2 Esquema numérico y computacional

KIVA consta de tres fases claramente definidas [47]. La fase A consiste en el cálculo de las reacciones químicas y la resolución de la interacción de las gotas del combustible inyectado con el gas en la cámara [42, 46], en la fase B se resuelven las ecuaciones de conservación usando el método de los volúmenes finitos, las fases A y B son resueltas usando un esquema Lagrangiano [42, 47]; y en la fase C, también llamada la fase Euleriana, se rediscretiza el dominio para calcular la convección del fluido y el movimiento de la malla usando un esquema Euleriano [46, 47]]. Durante esta fase coexisten los fenómenos de transporte de momento, energía y masa [42]. En caso de que la solución no converja en los márgenes de error permitidos, KIVA disminuye el paso de tiempo, halla nuevos valores para todas las variables y vuelve a resolver las ecuaciones de conservación, hasta que el criterio de convergencia se cumpla [42, 46, 47].

### ▪ Métodos de discretización

KIVA discretiza temporalmente por el método de las diferencias finitas, y discretiza espacialmente por el método de los volúmenes finitos [42, 46, 47]. La discretización espacial se basa en el método ALE (*Arbitrary Lagrangian-Eulerian*), este método consiste en usar volúmenes de control móviles-Lagrangianos y estáticos-Eulerianos, en las diferentes fases (A, B y C) en las que se encuentran las soluciones de las ecuaciones gobernantes [42, 50].

ALE es un método de volúmenes finitos, usado para hexaedros arbitrarios (o polígonos de cuatro lados arbitrarios en dos dimensiones). Las ecuaciones de movimiento son formuladas con base en una velocidad móvil  $\mathbf{U}$ , la cual varía entre 0 y  $\mathbf{u}$ , siendo  $\mathbf{u}$  el vector de velocidades del fluido, por lo que para  $\mathbf{U} = 0$  se tiene una formulación completamente Euleriana, y para  $\mathbf{U} = \mathbf{u}$  se tiene una formulación completamente Lagrangiana [50]. Por otro lado en KIVA todas las derivadas temporales son aproximadas usando esquemas implícitos de diferencias finitas, de la siguiente manera [46, 47].

$$\frac{\partial Q}{\partial t} \approx \frac{Q^{n+1} - Q^n}{\Delta t^n} \quad \text{Donde} \quad \Delta t^n = t^{n+1} - t^n \quad (63)$$

Cualquier paso de tiempo en KIVA se resuelve en tres fases, donde los resultados de la primera fase se usan en el cálculo de la segunda, y los de la segunda fase en la tercera, de la siguiente manera [46, 47, 50].

$$Q^n \rightarrow Q^A \rightarrow Q^B \rightarrow Q^{n+1} \quad (64)$$

KIVA usa el método theta en su discretización temporal, con este método se tiene que la derivada temporal se aproxima de la siguiente manera [47].

$$\frac{\partial Q}{\partial t} \approx \frac{Q^{n+1} - Q^n}{\Delta t^n} = \theta(\text{Metodo Implicito}) + (1 - \theta)(\text{Metodo Explicito}) \quad (65)$$

Donde para  $\theta = 1$  se tiene un método completamente implícito, para  $\theta = 0$  se tiene un método completamente explícito y para  $\theta = 1/2$  se tiene el método de Crank-Nicholson. En KIVA se usa un método más general en el que  $\theta$  varía con el tiempo [46, 47, 50]. Finalmente, como observamos en la ecuación (63), el paso de tiempo en KIVA varía para cada ciclo dependiendo de criterios de estabilidad. El paso de tiempo está limitado basado en consideraciones de precisión, dicho paso de tiempo se escoge teniendo en cuenta: la condición de Courant, la distorsión de la celda en la fase Lagrangiana, un valor predeterminado para un paso de tiempo máximo, introducido por el usuario, un paso de tiempo basado en el avance máximo del cigüeñal y la tasa de liberación de energía por el término fuente química y la evaporación. Así, el paso de tiempo para el siguiente ciclo es el menor de todos los anteriores [42, 50].

#### ▪ Métodos de solución

En KIVA, más específicamente en la fase B del proceso, se resuelven las ecuaciones de conservación de masa para la especie, seguido a esto se aplica un método SIMPLE modificado para calcular las velocidades, las temperaturas y las presiones en cada celda [42, 50]. Finalmente una vez terminadas las iteraciones del método SIMPLE, se procede a encontrar los valores de  $k$  y  $\epsilon$  para cada celda, para esto último se utiliza el método de residuos conjugados [42, 47, 50]. En una situación ideal, las velocidades en un nuevo paso de tiempo en una simulación numérica se calcularían a partir de gradientes de presión provenientes del siguiente paso de tiempo [47, 50]. Utilizar presiones de un tiempo avanzado requiere un procedimiento de solución iterativa, porque estas dependen de las aceleraciones y velocidades calculadas a partir de las mismas. El algoritmo original que incorpora presiones de pasos de tiempo posteriores es denominado algoritmo SIMPLE [50]. Las densidades parciales y los valores de  $k - \epsilon$ , se evalúan por fuera del método

SIMPLE, debido principalmente a que estas ecuaciones están débilmente acopladas a la solución del campo de flujo, por lo que resolverlas en un algoritmo diferente es una práctica viable [42, 46]. Por otro lado el retirar dichas ecuaciones del método SIMPLE causa que el costo computacional disminuya, principalmente si existe un gran número de especies, ya que por cada especie existe una ecuación de conservación (43) que debe resolverse [46].

### A.2.1 Acople entre KIVA-4 y Cantera

El acople de Cantera a KIVA consiste en calcular una densidad parcial inicial en KIVA para Cantera, después nuevas densidades parciales son generadas por Cantera, usando un modelo de reactor a volumen constante (RVC), y son entregadas de nuevo a KIVA, para que en este software se completen los cálculos en el esquema principal de avance temporal [41, 42, 43]. En cantera cada celda de la discretización espacial se considera un RVC, sin paredes y sin intercambio de masa o cualquier trabajo ejercido sobre él, durante el cálculo de la cinética [41, 42, 43]. Las incógnitas a resolver en el RVC son la composición y la temperatura de la mezcla, y dichas incógnitas son encontradas en Cantera [41, 42, 43]. Con el objetivo de minimizar el costo computacional en el acople entre los dos programas de software, fue necesario implementar un *Split* temporal, paso de tiempo dividido o separación temporal [42]. El operador *Splitting* en la simulación de procesos de combustión, consiste en separar tanto los términos convectivos como los difusivos de la cinética de reacción [59, 60, 61, 62].

El uso de *Splitting* en la simulación de la combustión se caracteriza por la existencia de métodos de alto orden, porque permite el uso de programas de software dedicados para cada escala temporal (Razón principal por la que se implementó en el acople de interés), y por su menor capacidad de almacenamiento y optimización [42, 59, 61, 62]. La amplia gama de escalas de tiempo presentes en la química de la combustión normalmente limitan el paso del tiempo en la simulación [61, 62]. Esto se debe a que las escalas más pequeñas son importantes incluso después de que las especies más rápidas ya han evolucionado [62]. En las ecuaciones de conservación es posible notar que no existe un acople directo entre los términos convectivos, y la tasa de reacción. Sin embargo los tiempos característicos de flujo y cinéticos en estos términos afectan la solución [42]. Ya que dichos tiempos presentan cambios en varios ordenes de magnitud y su acople es débil, en KIVA-UN se hace uso del criterio del número de Damkohler ( $Da$ ) aplicado al algoritmo SIMPLE, de tal modo que se pueda mantener  $Da = 1$  [42]. El número de Damkohler es la razón

entre la escala de tiempo del flujo y la escala de tiempo de la reacción química. Si el flujo es muy rápido, es decir que tiene una escala de tiempo pequeña, entonces  $Da \rightarrow 0$ . En este régimen las fuerzas inerciales y viscosas contribuyen más en el comportamiento del fluido. Por otro lado, si la liberación de energía es muy rápida, las especies tendrán una escala de tiempo pequeña, y por lo tanto  $Da \rightarrow \infty$ . Entonces la liberación de energía dictamina el comportamiento del fluido. Para lograr mantener el número de Damkohler igual a 1, es preciso usar un subciclado que separe la solución, usando un reactor que conserve la masa constante [41, 42, 43, 61, 62].

En el acople de KIVA-UN se sigue el siguiente procedimiento. Se comienza con las rutinas originales de KIVA, pero cuando éste llama la subrutina a cargo de los cálculos cinéticos, se llama a Cantera, donde KIVA entrega a Cantera las condiciones actuales del reactor (presión, volumen, temperatura, tiempo característico del fluido (paso de tiempo del fluido)), y fracciones másicas de las especies [42]. Seguido a esto Cantera resuelve la Cinética en cada reactor usando el tiempo característico de las especies (pequeños pasos de tiempo hasta alcanzar el tiempo característico del fluido) [42]. En cantera cada RVC se considera aislado y se resuelve la cinética con la mezcla actual. Al tener el reactor aislado con masa constante, las ecuaciones de conservación de especies y de energía se resuelven sin considerar los fenómenos convectivos, difusivos, y los términos fuente por turbulencia y por el chorro de combustible [42]. Dicho en otras palabras, en Cantera se considera que el cambio de masa de la especie “m” y de la energía interna en cada celda, se da únicamente por la contribución de las reacciones químicas. Al resolver cada RVC y al final del subciclo, Cantera devuelve a KIVA las nuevas fracciones másicas y la energía interna en cada celda, entonces KIVA acopla el reactor con el fluido a través de transporte difusivo, y resuelve nuevamente las ecuaciones de conservación y de turbulencia para tratar de encontrar valores adecuados de temperatura, presión y velocidad para la nueva mezcla [42]. De esta forma en KIVA las ecuaciones de conservación de energía y de especies se resuelven sin considerar el término fuente por las reacciones químicas.

### A.3 Mecanismos de reacción

Los procesos de combustión en su mayoría, están descritos por reacciones químicas, de carácter global [35, 38]. Para estudiar la cinética de reacción es necesario subdividir la reacción global en reacciones más pequeñas, denominadas reacciones elementales [35]. El conjunto de reacciones elementales se denomina mecanismo de reacción, y existen

globales, cuasi-globales y elementales semidetallados o detallados [35, 38]. Para el caso de los gases derivados de biomasa, existen diversos mecanismos de reacción que pueden ser aplicados para modelar la cinética de reacción, los más utilizados y validados en la literatura son [7, 63, 64]: El mecanismo Konnov (127 especies y 1207 reacciones elementales) [65], el mecanismo GRI 3.0 (53 especies y 325 reacciones elementales) [66], el mecanismo DRM22 (22 especies y 104 reacciones elementales) [67], y el mecanismo C1-C4 de Heghes (61 especies y 412 reacciones elementales) [68].

El mecanismo Konnov es el más costoso computacionalmente debido a que es el de más reacciones y especies entre los mencionados anteriormente [64]. Por otro lado el mecanismo GRI 3.0 fue desarrollado inicialmente para estudiar la cinética de la combustión del metano [66], sin embargo en la literatura se reporta que también modela con éxito la combustión de gases de síntesis [7, 64, 69]. El mecanismo DRM22, es un mecanismo derivado del mecanismo GRI 3.0, por lo que en ocasiones también es llamado la versión esquelética del mecanismo GRI 3.0 [7, 64, 67]. DRM22 fue desarrollado utilizando un análisis de flujo bajo condiciones de referencia [64, 67]. Por su parte Heghes desarrolló un mecanismo de reacción para los hidrocarburos C1-C4 (hidrocarburos que tienen 4 o menos átomos de carbono en sus moléculas) [64, 68], este también es un mecanismo derivado del mecanismo GRI 3.0. En general contiene todas las reacciones del GRI, excepto las que implican N<sub>2</sub>, ya que para el modelo desarrollado permanece siempre inerte; sin embargo este mecanismo contiene algunas especies y reacciones adicionales al GRI [7, 64, 68].

Con base en lo anterior, se realizó como parte de este proyecto un estudio computacional de los cuatro mecanismos de reacción semidetallados anteriormente expuestos [64]. El objetivo de dicho estudio fue evaluar el desempeño que tiene cada uno de ellos, en la modelación de la cinética de combustión de gases de síntesis derivados de biomasa [64]. El retraso de encendido es el tiempo que le toma a una mezcla aire-combustible para alcanzar su energía de activación, bajo unas condiciones de presión y temperatura determinadas. Esta variable es dependiente de las velocidades de reacción presentes en un mecanismo cinético. De esta forma, el retraso de encendido es muy utilizado en la literatura para la comparación, evaluación y ajuste de los mecanismos de reacción [7]. Para lograr lo anterior se realizaron simulaciones con el propósito de calcular el retraso de encendido, bajo diferentes condiciones en la composición del gas de síntesis, la temperatura inicial, la presión y la relación de equivalencia [64]. El retraso de encendido

tiene diferentes formas de cuantificarse, sin embargo se ha encontrado que la mejor forma de calcularlo es asumiendo que la combustión se da a presión constante y en el momento de máxima concentración de la especie OH [7]. Entonces, las simulaciones se llevaron a cabo en un reactor a presión constante, suponiendo que el tiempo de encendido coincide con el momento de máxima concentración de OH. De esta forma, el desempeño de los mecanismos semidetallados se cuantificó por medio del cálculo de errores relativos, tomando como referencia el tiempo de encendido que se obtuvo a partir del mecanismo detallado de Westbrook (5030 reacciones elementales y 1282 especies) [70, 71].

Se encontró que en concordancia con estudios previamente realizados el mecanismo GRI es el que globalmente presenta un mejor desempeño, y la exactitud de los resultados por todos los mecanismos en general aumenta a medida que disminuye el contenido de hidrógeno en el gas combustible [7, 64]. Sin embargo en este estudio se encontró que el mecanismo C1-C4 de Heghes presenta las predicciones con los errores más grandes (generalmente mayores al 60%), por lo que no se recomienda su uso bajo ninguna de las condiciones consideradas [64]. Por otro lado, aunque el mecanismo GRI es el que globalmente realiza las mejores predicciones, si se desea realizar simulaciones con una composición específica del gas, y para valores específicos de presión, temperatura inicial y relación de equivalencia, debe utilizarse el mecanismo que presente el menor error relativo respecto a Westbrook para los valores en cuestión de dichos parámetros [64]. Por ejemplo, el mecanismo de Konnov, a pesar de tener un error global mayor al mecanismo GRI, es el más recomendado en el caso de querer realizar simulaciones para mezclas ricas, presión atmosférica o temperaturas por encima de 2000 [K] [64]. Este estudio se expuso en ponencia y fue publicado en el encuentro de Investigadores 2017 de la Facultad de Ingeniería de la Universidad Nacional de Colombia, Sede Bogotá [64].

Finalmente en diversos estudios se resalta el uso de mecanismos reducidos, globales o quasi-globales, para ser utilizados en simulaciones de sistemas complejos tales como hornos, reactores, calderas o motores, ya que reducen considerablemente el costo computacional, presentando resultados cercanos en las variables de interés a los otorgados por los mecanismos elementales semidetallados o detallados [31, 36, 72, 73, 74, 75, 76, 77].

## Anexo B. Optimización computacional de MCI

Existen diferentes métodos de optimización computacional aplicables a MCI, la mayoría de ellos pueden clasificarse en los grupos que se explican a continuación.

- **Optimización con estudios paramétricos**

Las soluciones óptimas pueden encontrarse a través de estudios paramétricos, los cuales se extienden sobre el rango de las variables de diseño con el uso de herramientas de modelado [17].

En este tipo de métodos, el número de evaluaciones necesarias para alcanzar los óptimos, aumenta significativamente con el número de variables de diseño, razón por la cual es inviable su aplicación en problemas de optimización complejos [78]. La experiencia y la intuición son indispensables para realizar eficientemente dichos estudios [78].

Los estudios paramétricos sobre un rango completo en las variables de diseño, crean un espacio paramétrico grande, lo que causa un impedimento para la optimización de los motores, utilizando herramientas de modelado CFD computacionalmente costosas [17], de esta forma nuevamente la experiencia junto con datos experimentales confiables son necesarios para reducir el rango de estudio.

Debido a estas dificultades, los estudios paramétricos son ineficientes para un gran número de variables de diseño, un amplio rango paramétrico, funciones objetivo contradictorias o si se desean óptimos globales [17].

- **Optimización con métodos no evolutivos**

Los métodos de optimización sistemática, generalmente logran evadir las dificultades que tienen los estudios paramétricos, sustituyendo la inteligencia humana por metodologías de búsqueda sistematizadas [17].

El rendimiento de los métodos no evolutivos depende bastante de la información matemática concerniente al espacio de las funciones objetivo, como el gradiente de dichas funciones [78]. En problemas de optimización complejos tales gradientes suelen ser muy complicados de calcular, lo que limita considerablemente la aplicación de estos métodos en la optimización de motores de combustión interna y hace preferible el uso de los métodos evolutivos [17].

Estos métodos también se conocen como métodos con gradiente, y operan buscando puntos estacionarios para posteriormente localizar las soluciones óptimas [78]. Esta metodología suele ser bastante eficiente, sin embargo requiere que todo el espacio objetivo sea diferenciable y que el óptimo local corresponda al óptimo global [17].

#### ▪ Optimización con métodos evolutivos

En comparación con los métodos no evolutivos, los métodos evolutivos como los GA y los métodos de optimización por enjambre de partículas (PSO), han sido ampliamente utilizados en la optimización de motores, debido a su gran aplicabilidad en problemas complejos no lineales [17]. Estos métodos son de carácter heurístico, por ello, usan los parámetros de entrada y presentan soluciones para impulsar su búsqueda hacia los óptimos [17].

Con base en diferentes postulados científicos u observaciones de comportamientos biológicos, se fundamentan diferentes técnicas heurísticas, las cuales se utilizan para determinar las direcciones de búsqueda de las soluciones óptimas [17]. Por otra parte, la prueba matemática estricta de la convergencia de estos métodos, es generalmente imposible de obtener, no obstante se ha encontrado que estos métodos son bastante aplicables y eficientes en la optimización de MCI [17].

En la optimización de funciones objetivo múltiples, es necesario definir una función de mérito único, o función de “*fitness*” que incluya el cumplimiento de cada objetivo [79]. En general definir apropiadamente la función de mérito tiende a ser una tarea poco clara para problemas de optimización reales [79]. Esto incrementa el interés por el estudio y la aplicación de los métodos evolutivos multiobjetivo, y los convierte en el enfoque predominante en la optimización de motores [17]. En la práctica, la optimización de motores, bajo todas las condiciones de operación, es de bastante interés, sin embargo incrementa significativamente la dificultad del problema [17]. Normalmente los óptimos encontrados a partir de una condición de funcionamiento específica no son aplicables bajo



otra configuración del motor, por otro lado un gran número de variables de diseño, no son ajustables para diferentes condiciones de operación [17]. Por su parte, para la optimización de motores, hacer uso de simulaciones CFD con modelos de cinética química detallada, no es una práctica recomendable, ya que el elevado costo computacional ocasiona que el ciclo de optimización sea excesivamente largo [17]. Sin embargo es necesario resaltar la confiabilidad de los resultados obtenidos utilizando química detallada, y el uso de métodos de optimización eficientes con simulaciones aceleradas disminuyen considerablemente el costo computacional, ocasionando que la optimización computacional sea aún más competitiva sobre los estudios experimentales [1].

## B.1 Algoritmos genéticos

Los GA imitan los principios evolutivos de la naturaleza, particularmente el comportamiento del ecosistema que obedece la teoría de Darwin, la cual entre sus principios estipula la supervivencia del más apto [79]. La búsqueda en los GA, utiliza los atributos más adecuados de diseños o individuos, previamente evaluados, para generar nuevos individuos, evolucionando el proceso de optimización hacia mejores soluciones [79].

Los GA empiezan con varios individuos que se obtienen generalmente al azar, donde el número de individuos que se evalúan en cada iteración, o generación, se denomina el tamaño de población [79]. De esta forma, los individuos con más mérito, tienen una mayor probabilidad de sobrevivir y reproducirse, para la siguiente generación [79]. Análogamente a la mutación genética existente en la naturaleza, se introducen cambios aleatorios en las variables de diseño, para evitar los óptimos locales, y mantener la diversidad genética en las soluciones [79]. De esta forma, los parámetros que influyen en el cruce y la mutación, son fundamentales para el rendimiento de los GA [17].

A continuación se explica de una forma más detallada los pasos que sigue un GA simple para encontrar la solución óptima a un problema.

- 1) En primer lugar se genera la población inicial de tamaño N, también denominada generación 0, de forma aleatoria [79].
- 2) Se evalúa el desempeño o “*fitness*” de cada uno de los individuos de la generación anterior [79]. El “*fitness*” es directamente proporcional al cumplimiento del objetivo

planteado, es decir que un individuo tendrá mejor desempeño, entre más se acerque a la solución óptima [79].

- 3) En problemas de optimización restringida, es necesario penalizar el “*fitness*” de los individuos que violen las restricciones impuestas, tanto en el espacio de búsqueda, como en el espacio objetivo [79]. En otras palabras, si un individuo no se encuentra en uno o más de los rangos predeterminadamente definidos para cada una de las variables de diseño y cada una de las funciones objetivo, este se penalizará disminuyendo su desempeño, donde dicha disminución depende de que tan grave fue la violación [79].
- 4) Con base en el desempeño, se seleccionan los individuos que serán los padres de la siguiente generación. A mayor desempeño, mayor probabilidad de ser seleccionados [79].
- 5) Mediante el emparejamiento y posterior cruce de los padres se generan N hijos [79]. Este emparejamiento suele hacerse al azar, por su parte el cruce consiste en que los hijos hereden los mejores genes de cada uno de sus padres [79]. Los genes representan de forma binaria o real, los valores de cada una de las variables de diseño estudiadas en el espacio de búsqueda [79], es decir que el número de genes que identifica a un individuo es igual al número de variables a optimizar.
- 6) Basándose en una probabilidad de mutación, y unas magnitudes máximas de mutación en cada una de las variables de diseño, parámetros definidos por el usuario, se cambian o mutan los valores de algunas variables de diseño, para algunos de los hijos engendrados en el paso anterior [79].
- 7) Se reemplaza la población anterior por los N hijos resultantes del paso 6, para así conformar una nueva generación [79].
- 8) Se regresa al paso 2, hasta evaluar un número de generaciones predeterminado, o hasta alcanzar los óptimos globales del problema [79].

## B.2 Algoritmos genéticos multiobjetivo

La diferencia fundamental entre los problemas de objetivo único y multiobjetivo, es que para el primer caso solo existe una solución óptima en cualquier etapa del proceso evolutivo, mientras que para un problema multiobjetivo, las funciones deben ser contradictorias, lo que resulta en varias soluciones óptimas, que requieren ser tratadas simultáneamente por el método evolutivo [79]. La noción de óptimo en este tipo de

problemas se conoce como el frente de Pareto. Este concepto estipula que no existen otras soluciones que superen simultáneamente el óptimo en todas las funciones objetivo, para alguna de las soluciones que componen dicho frente [17].

Existe un número considerable de MOGA, entre los que se destacan el micro GA o I-GA, el NSGA II y el MOGA de rango adaptativo (ARMOGA) [17]. Estos tres métodos comparten principalmente dos características comunes. En primer lugar utilizan un operador de preservación de la élite, es decir que los padres tienen la oportunidad de competir con sus descendientes, y llegado el caso de superarlos, reevaluarse en la siguiente generación [17].

Por otro lado, basándose en el concepto de que en la evolución natural la variabilidad genética es beneficiosa para la procreación de mejor descendencia, estos algoritmos buscan preservar la diversidad, dando preferencia a los individuos que se encuentren en las regiones menos evaluadas [17].

La principal ventaja del I-GA es que para este algoritmo basta un tamaño de población relativamente pequeño, lo que se traduce en requerir menor capacidad de cómputo para completar una generación [17]. Normalmente un tamaño de población reducido conduce a óptimos menos diversificados, sin embargo el I-GA implementa un proceso de reinicialización combinado con un archivo externo para almacenar óptimos previamente generados, así como un algoritmo adicional para mantener la diversidad [17].

A diferencia de otros MOGA, la memoria del I-GA se divide en dos partes, una reemplazable y otra no reemplazable [17]. En primera instancia, este algoritmo se alimenta inicialmente por poblaciones generadas aleatoriamente para la primera generación, donde la memoria no reemplazable mantendrá todas sus poblaciones durante toda la evolución, al final de cada iteración los óptimos encontrados se comparan con la memoria externa y la memoria reemplazable, y en dado caso de tener mejor desempeño, la población será reemplazada [17]. Esta técnica busca que la evolución converja al verdadero frente de Pareto, prefiriendo las regiones del dominio menos concurridas [17].

Por su parte el NSGA II emplea tanto la estrategia de preservación de la élite, como un método explícito para preservar la diversidad [17]. Comenzando, se genera aleatoriamente una población de tamaño predefinido, la cual se somete a procedimientos convencionales de selección, cruce y mutación para producir la siguiente generación [17]. A partir de la

segunda generación los padres compiten con su descendencia, introduciendo el elitismo, donde se da preferencia a los individuos con un rango más amplio [17].

Finalmente ARMOGA centra su búsqueda en un concentrado espacio de diseño prometedor, en el cual se encuentra la mayoría de las soluciones optimas potenciales, resultando en una convergencia rápida hacia el frente de Pareto [17]. Este método utiliza una función de aptitud con la ayuda del enfoque de compartición estándar, garantizando diversidad, y así determinar la preferencia de la población para la próxima generación [17].

## Anexo C. Archivos de entrada para los casos de validación y optimización

En este anexo se presentan los archivos de entrada “itape5” utilizados en los casos de validación y posteriormente en los casos de optimización a 2500 y 4500 [RPM].

### C.1 Caso C1 y optimización a 2500 [RPM]

```
Motor Lombardini LGW-523
irest 0
nohydro 0
itype 1
lwall 1
lpr 0
irez 2
ncfilm 9999999
nctap8 9999999
nclast 9999999
ncmon 10
ncaspec 0
gmv 0.0
cafilm 800.0
cafin 720.0
angmom 1.0
pgssw 0
dti 1.0e-6
dtmxca 1.0
dtmax 0.5e-3
tlimd 0
twfilm 9.99e+9
twfin 9.99e+9
fchsp 0.25
bore 7.2000
stroke 8.24179444415548
squish 0.50
rpm 2500.0
atdc 0.0
datdct 0.0
revrep 2.0
conrod 10.7
swirl 0.0
swipro 3.11
thsect 360.0
sector 0.0
deact 0.0
epsy 1.0e-3
epsv 1.0e-3
epsp 1.0e-4
epst 1.0e-3
```

```
epsk 1.0e-3
epse 1.0e-3
gx 0.0
gy 0.0
gz 0.0
tcylw1 380.0
thead 443.0
tpistn 500.0
pardon 0.0
a0 0.0
b0 1.0
artvis 0.0
ecnsrv 0.0
adia 0.0
anu0 0.0
visrat -0.66666667
tcut 1000.0
tcute 2500.0
epschm 0.02
omgchm 1.0
turbsw 2.0
sgsl 0.0
trbchem 2.0
capa 18.0
pmplict 2.0
lospeed 0.0
airmul 1.457e-5
airmu2 110.0
airla1 252.0
airla2 200.0
prl 0.74
rpr 1.11
rsc 1.78
xignit 2.6e+3
talign -1.0
tdign -1.0
calign 342.2
cadign 22.5
xignl1 -0.25
xignr1 0.25
yignf1 1.11
yignd1 1.61
zignb1 -0.55
zigt1 0.45
xignl2 0.0
xignr2 0.0
yignf2 0.0
yignd2 0.0
zignb2 0.0
zigt2 0.0
kwikeq 0
numnoz 1
numinj 1
numvel 1
tlinj -1.0
tdinj -1.0
calinj 999999.0
cadinj 12.672
tspmas 0.070
tnparc 1000.0
pulse 2.0
injdist 0
kolide 0
tpi 293.15
turb 0.0
breakup 0.0
```

```
evapp      0.0
numdiv    10
scf        10.0
drnoz     0.0
dznoz     0.0
dthnoz    22.5
tiltxy    22.5
tiltxz    30.0
cone       62.5
dcone     12.5
anoz       7.07e-4
smr        0.015
amp0       0.0
diameterinjector   0.0
1400.0
nsp         12   1
ch4         1.0000  0.0000
o2          mw2    31.99880htf2      0.00000
n2          mw3    28.01348htf3      0.00034
co2         mw4    44.00980htf4     -94.05061
h2o         mw5    18.01528htf5     -57.79747
h           mw6    1.00794htf6      52.10257
h2          mw7    2.01588htf7      0.00000
o           mw8    15.99940htf8      59.55393
n           mw9    14.00674htf9     112.97258
oh          mw10   17.00734htf10     9.40413
co          mw11   28.01040htf11    -26.41715
no          mw12   30.00614htf12    21.81273
stoifuel    1.0
stoio2      2.0
nregions     4
presi       0.692304424533e+6   0.692304424533e+6 0.692304424533e+6
8.39186857285306e+6
tempi       300.84104              300.84104      300.84104      300.84104
tkei        0.0                   0.0             0.0            0.0
scli        0.0                   0.0             0.0            0.0
er          0.0                   0.0             0.0            0.0
mfracfu     0.0                   0.0             0.0            0.0986074388
mfraco2     0.2329076299          0.2329076299   0.2329076299   0.0
mfracn2     0.7670923701          0.7670923701   0.7670923701   0.0
mfracco2    0.0                   0.0             0.0            0.2459193184
mfrach2o    0.0                   0.0             0.0            0.0
mfrach      0.0                   0.0             0.0            0.0
mfrach2     0.0                   0.0             0.0            0.0450590394
mfraco      0.0                   0.0             0.0            0.0
mfracn      0.0                   0.0             0.0            0.0
mfraccoh    0.0                   0.0             0.0            0.0
mfracco     0.0                   0.0             0.0            0.6104142034
mfracno     0.0                   0.0             0.0            0.0
nrk         6
cf1         1.3000e+8 ef3      2.5358e+4 zf3      0.0
cb1         0.0 eb3      0.0 zb3      0.0
am1         1      2      0      0      0      0      0      0      0      0
bm1         0      0      0      1      2      0      0      0      0      0
ae1         -0.30  1.300  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000
be1         0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000
cf2         2.0000e10 ef4      2.4754e+4 zf4      0.0
cb2         0.0 eb4      0.0 zb4      0.0
am2         0      1      0      0      0      2      0      0      0      0
bm2         0      0      0      0      2      0      0      0      0      0
ae2         0.000  0.500  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  1.000  0.000  0.000
be2         0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000
```





```
sclamb 4.8
velin 0.0
reedin 1.0
reedout 1.0
nregin0 2
nregamb 3
numpcc 2
0.0 0.692304424533e+6
720.0 0.692304424533e+6
numpex 2
0.0 0.692304424533e+6
720.0 0.692304424533e+6
```

## C.2 Caso C2

```
Motor Lombardini LGW-523
irest 0
nohydro 0
itype 1
lwall 1
lpr 0
irez 2
ncfilm 9999999
nctap8 9999999
nclast 9999999
ncmon 10
ncaspec 0
gmw 0.0
cafilm 800.0
cafin 720.0
angmom 1.0
pgssw 0
dti 1.0e-6
dtmxca 1.0
dtmax 0.5e-3
tlimd 0
twfilm 9.99e+9
twfin 9.99e+9
fchsp 0.25
bore 7.2000
stroke 8.24179444415548
squish 0.50
rpm 2500.0
atdc 0.0
datdct 0.0
revrep 2.0
conrod 10.7
swirl 0.0
swipro 3.11
thsect 360.0
sector 0.0
deact 0.0
epsy 1.0e-3
epsv 1.0e-3
epsp 1.0e-4
epst 1.0e-3
epsk 1.0e-3
epse 1.0e-3
gx 0.0
gy 0.0
gz 0.0
tcylwl 380.0
thead 443.0
tpistn 500.0
```

```
pardon 0.0
a0      0.0
b0      1.0
artvis  0.0
ecnsrv  0.0
adia    0.0
anu0    0.0
visrat -0.66666667
tcut    1000.0
tcute   2500.0
epschm  0.02
omgchm  1.0
turbsw  2.0
sgsl     0.0
trbchem 2.0
capa     18.0
pmplict      2.0
lospeed      0.0
airmul1 1.457e-5
airmu2 110.0
airla1 252.0
airla2 200.0
prl     0.74
rpr     1.11
rsc     1.78
xignit  2.6e+3
tlinj   -1.0
tdign   -1.0
calign  342.2
cadign  22.5
xignl1  -0.25
xignr1  0.25
yignf1  1.11
yignd1  1.61
zignb1  -0.55
zignt1  0.45
xignl2  0.0
xignr2  0.0
yignf2  0.0
yignd2  0.0
zignb2  0.0
zignt2  0.0
kwikeq  0
numnoz  1
numinj  1
numvel  1
tlinj   -1.0
tdinj   -1.0
calinj  999999.0
cadinj  12.672
tspmas  0.070
tnparc  1000.0
pulse   2.0
injdist      0
kolide  0
tpi     293.15
turb     0.0
breakup      0.0
evapp    0.0
numdiv   10
scf      10.0
drnoz    0.0
dznoz    0.0
dthnoz   22.5
tiltxy   22.5
tiltxz   30.0
```

```

cone      62.5
dccone    12.5
anoz      7.07e-4
smr       0.015
amp0      0.0
diameterinjector 0.0
1400.0
  nsp      12  1
gasoline   1.0      0.00001
  o2      mw2      31.99880htf2      0.00000
  n2      mw3      28.01348htf3      0.00034
  co2     mw4      44.00980htf4     -94.05061
  h2o     mw5      18.01528htf5     -57.79747
  h       mw6      1.00794htf6      52.10257
  h2      mw7      2.01588htf7      0.00000
  o       mw8      15.99940htf8      59.55393
  n       mw9      14.00674htf9     112.97258
  oh      mw10     17.00734htf10      9.40413
  co      mw11     28.01040htf11     -26.41715
  no      mw12     30.00614htf12     21.81273
stoifuel   1.0
stoio2     2.0
nregions    4
  presi    0.763370159013e+6    0.763370159013e+6    0.763370159013e+6    0.92873768e+6
  tempi     300.84104           300.84104           300.84104           300.84104
  tkei      0.0                0.0                0.0                0.0
  scli      0.0                0.0                0.0                0.0
  er        0.0                0.0                0.0                0.0
mfracfu    0.0                0.0                0.0                1.00000
mfraco2    0.2329076299        0.2329076299        0.2329076299        0.0
mfracn2    0.7670923701        0.7670923701        0.7670923701        0.0
mfracco2   0.0                0.0                0.0                0.0
mfracch2o  0.0                0.0                0.0                0.0
mfracch    0.0                0.0                0.0                0.0
mfracch2   0.0                0.0                0.0                0.0
mfraco     0.0                0.0                0.0                0.0
mfracn     0.0                0.0                0.0                0.0
mfraccoh   0.0                0.0                0.0                0.0
mfracco    0.0                0.0                0.0                0.0
mfracno    0.0                0.0                0.0                0.0
nrk        5
  cf1      1.0000e10 ef1      1.3965e+4 zf1      0.0
  cb1      0.0      eb1      0.0      zb1      0.0
  am1      4      49      0      0      0      0      0      0      0      0
  bm1      0      0      0      32      34      0      0      0      0      0
  ae1      0.250      1.500      0.000      0.000      0.000      0.000      0.000      0.000
           0.000      0.000      0.000      0.000
  be1      0.000      0.000      0.000      0.000      0.000      0.000      0.000      0.000
           0.000      0.000      0.000      0.000
  cf2      2.0000e+8 ef2      1.5345e+4 zf2      0.8
  cb2      0.0      eb2      0.0      zb2      0.0
  am2      0      1      0      0      0      0      0      0      0      0
  bm2      0      0      0      2      0      0      0      0      0      0
  ae2      0.000      0.500      0.000      0.000      0.000      0.000      0.000      0.000
           0.000      0.000      1.000      0.000
  be2      0.000      0.000      0.000      0.000      0.000      0.000      0.000      0.000
           0.000      0.000      0.000      0.000
  cf3      7.6000e13 ef2      3.8000e+4 zf2      0.0
  cb3      1.6000e13 eb2      0.0      zb2      0.0
  am3      0      0      1      0      0      0      0      1      0      0
  bm3      0      0      0      0      0      0      0      0      1      0
  ae3      0.000      0.000      1.000      0.000      0.000      0.000      0.000      1.000
           0.000      0.000      0.000      0.000
  be3      0.000      0.000      0.000      0.000      0.000      0.000      0.000      0.000
           1.000      0.000      0.000      1.000
  cf4      6.4000e+9 ef2      3.1500e+3 zf2      1.0

```



### C.3 Caso C3 y optimización a 4500 [RPM]

```
Motor Lombardini LGW-523
irest 0
nohydro 0
itype 1
lwall 1
lpr 0
irez 2
ncfilm 9999999
nctap8 9999999
nclast 9999999
ncmon 10
ncaspec 0
gmw 0.0
cafilm 800.0
cafin 720.0
angmom 1.0
pgssw 0
dti 1.0e-6
dtmxca 1.0
dtmax 0.5e-3
tlimd 0
twfilm 9.99e+9
twfin 9.99e+9
fchsp 0.25
bore 7.2000
stroke 8.24179444415548
squish 0.50
rpm 4500.0
atdc 0.0
datdct 0.0
revrep 2.0
conrod 10.7
swirl 0.0
swipro 3.11
thsect 360.0
sector 0.0
deact 0.0
epsy 1.0e-3
epsv 1.0e-3
epsp 1.0e-4
epst 1.0e-3
epsk 1.0e-3
epse 1.0e-3
gx 0.0
gy 0.0
gz 0.0
tcylwl 380.0
thead 443.0
tpistn 500.0
pardon 0.0
a0 0.0
b0 1.0
artvis 0.0
ecnsrv 0.0
adia 0.0
anu0 0.0
visrat -0.66666667
tcut 1000.0
tcute 2500.0
epschm 0.02
omgchm 1.0
turbsw 2.0
sgsl 0.0
trbchem 2.0
```

```

capa      18.0
pmplict      2.0
lospeed      0.0
airmul 1.457e-5
airmu2 110.0
airla1 252.0
airla2 200.0
prl      0.74
rpr      1.11
rsc      1.78
xignit 4.2236e+3
talign -1.0
tdign -1.0
calign 331.0
cadign 40.5
xignl1 -0.25
xignr1 0.25
yignf1 1.11
yignd1 1.61
zignb1 -0.55
zigt1 0.45
xignl2 0.0
xignr2 0.0
yignf2 0.0
yignd2 0.0
zignb2 0.0
zigt2 0.0
kwikey 0
numnoz 1
numinj 1
numvel 1
tlinj -1.0
tdinj -1.0
calinj 999999.0
cadinj 12.672
tspmas 0.070
tnparc 1000.0
pulse 2.0
injdist      0
kolide 0
tpi      293.15
turb      0.0
breakup      0.0
evapp 0.0
numdiv 10
scf      10.0
drnoz 0.0
dznoz 0.0
dthnoz 22.5
tiltxy 22.5
tiltxz 30.0
cone 62.5
dcone 12.5
anoz 7.07e-4
smr 0.015
amp0 0.0
diameterinjector      0.0
1400.0
  nsp      12  1
    ch4      1.0000  0.0000
    o2      mw2      31.99880htf2      0.00000
    n2      mw3      28.01348htf3      0.00034
    co2      mw4      44.00980htf4     -94.05061
    h2o      mw5      18.01528htf5     -57.79747
    h      mw6      1.00794htf6      52.10257
    h2      mw7      2.01588htf7      0.00000

```

```

o   mw8      15.99940htf8      59.55393
n   mw9      14.00674htf9     112.97258
oh  mw10     17.00734htf10     9.40413
co  mw11     28.01040htf11    -26.41715
no  mw12     30.00614htf12     21.81273
stoifuel      1.0
stoio2 2.0
nregions      4
presi 0.70471183155e+6  0.70471183155e+6  0.70471183155e+6  7.80218095969444e+6
tempi 298.819553      298.819553      298.819553      298.819553
tkei   0.0            0.0            0.0            0.0
scli   0.0            0.0            0.0            0.0
er      0.0            0.0            0.0            0.0
mfracfu 0.0            0.0            0.0            0.0986074388
mfraco2 0.2329076299    0.2329076299    0.2329076299    0.0
mfracn2 0.7670923701    0.7670923701    0.7670923701    0.0
mfracco2 0.0            0.0            0.0            0.2459193184
mfrach2o 0.0            0.0            0.0            0.0
mfrach   0.0            0.0            0.0            0.0
mfrach2  0.0            0.0            0.0            0.0450590394
mfraco   0.0            0.0            0.0            0.0
mfracn   0.0            0.0            0.0            0.0
mfracoh  0.0            0.0            0.0            0.0
mfracco  0.0            0.0            0.0            0.6104142034
mfracno  0.0            0.0            0.0            0.0
nrk      6
cf1 1.3000e+8 ef3 2.5358e+4 zf3 0.0
cb1 0.0 eb3 0.0 zb3 0.0
am1 1 2 0 0 0 0 0 0 0 0
bm1 0 0 0 1 2 0 0 0 0 0
ae1 -0.30 1.300 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000
0.000 0.000 0.000 0.000
be1 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000
0.000 0.000 0.000 0.000
cf2 2.0000e10 ef4 2.4754e+4 zf4 0.0
cb2 0.0 eb4 0.0 zb4 0.0
am2 0 1 0 0 0 0 2 0 0 0
bm2 0 0 0 0 2 0 0 0 0 0
ae2 0.000 0.500 0.000 0.000 0.000 0.000 1.000 0.000
0.000 0.000 0.000 0.000
be2 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000
0.000 0.000 0.000 0.000
cf3 2.0000e+8 ef2 1.5345e+4 zf2 0.8
cb3 0.0 eb2 0.0 zb2 0.0
am3 0 1 0 0 0 0 0 0 0 0
bm3 0 0 0 2 0 0 0 0 0 0
ae3 0.000 0.500 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000
0.000 0.000 1.000 0.000
be3 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000
0.000 0.000 0.000 0.000
cf4 7.6000e13 ef2 3.8000e+4 zf2 0.0
cb4 1.6000e13 eb2 0.0 zb2 0.0
am4 0 0 1 0 0 0 0 1 0 0
bm4 0 0 0 0 0 0 0 0 1 0
ae4 0.000 0.000 1.000 0.000 0.000 0.000 0.000 1.000
0.000 0.000 0.000 0.000
be4 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000
1.000 0.000 0.000 1.000
cf5 6.4000e+9 ef2 3.1500e+3 zf2 1.0
cb5 1.5000e+9 eb2 1.9500e+4 zb2 1.0
am5 0 1 0 0 0 0 0 0 0 0
bm5 0 0 0 0 0 0 0 1 0 1
ae5 0.000 1.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000
1.000 0.000 0.000 0.000
be5 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 1.000
0.000 0.000 0.000 1.000

```

```

cf6 4.1000e13 ef2 0.0 zf2 0.0
cb6 2.0000e14 eb2 2.3650e+4 zb2 0.0
am6 0 0 0 0 0 0 0 0 1 1 0 0
bm6 0 0 0 0 0 1 0 0 0 0 0 1
ae6 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000
    1.000 1.000 0.000 0.000
be6 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 1.000 0.000 0.000
    0.000 0.000 0.000 1.000
nre 6
as1 0.990207 bs1 -51.7916 cs1 0.993074 ds1 -0.343428 es1 0.0111668
an1 0 0 0 0 0 0 1 0 0 0 0 0
bn1 0 0 0 0 0 2 0 0 0 0 0 0
as2 0.431310 bs2 -59.6554 cs2 3.503350 ds2 -0.340016 es2 0.0158715
an2 0 1 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
bn2 0 0 0 0 0 0 0 2 0 0 0 0
as3 0.794709 bs3 -113.2080 cs3 3.168370 ds3 -0.443814 es3 0.0269699
an3 0 0 1 0 0 0 0 0 0 0 0 0
bn3 0 0 0 0 0 0 0 0 2 0 0 0
as4 -0.652939 bs4 -9.8232 cs4 3.930330 ds4 0.163490 es4 -0.0142865
an4 0 1 0 0 0 0 1 0 0 0 0 0
bn4 0 0 0 0 0 0 0 0 0 2 0 0
as5 1.158882 bs5 -76.8472 cs5 8.532155 ds5 -0.868320 es5 0.0463471
an5 0 1 0 0 2 0 0 0 0 0 0 0
bn5 0 0 0 0 0 0 0 0 0 4 0 0
as6 0.980875 bs6 68.4453 cs6 -10.5938 ds6 0.574260 es6 -0.0414570
an6 0 1 0 0 0 0 0 0 0 0 2 0
bn6 0 0 0 2 0 0 0 0 0 0 0 0
nvalves 2
vliftmin 0.004
skirtth 0.2
tmove 372.0
vtiltxz 0.0
nlift 244
vliftmin 0.004
skirtth 0.2
tmove 443.0
vtiltxz 0.0
nlift 244
isoot 0
distamb 2.0
pamb 0.70471183155e+6
tkeamb 423.0
sclamb 4.8
velin 0.0
reedin 1.0
reedout 1.0
nregin0 2
nregamb 3
numpcc 2
0.0 0.70471183155e+6
720.0 0.70471183155e+6
numpex 2
0.0 0.70471183155e+6
720.0 0.70471183155e+6

```

## C.4 Caso C4

```

Motor Lombardini LGW-523
irest 0
nohydro 0
itype 1
lwall 1
lpr 0
irez 2

```



```
ncfilm 9999999
nctap8 9999999
nclast 9999999
ncmon 10
ncaspec 0
gmw 0.0
cafilm 800.0
cafin 720.0
angmom 1.0
pgssw 0
dti 1.0e-6
dtmxca 1.0
dtmax 0.5e-3
tlimd 0
twfilm 9.99e+9
twfin 9.99e+9
fchsp 0.25
bore 7.2000
stroke 8.24179444415548
squish 0.50
rpm 4500.0
atdc 0.0
datdct 0.0
revrep 2.0
conrod 10.7
swirl 0.0
swipro 3.11
thsect 360.0
sector 0.0
deact 0.0
epsy 1.0e-3
epsv 1.0e-3
epsp 1.0e-4
epst 1.0e-3
epsk 1.0e-3
epse 1.0e-3
gx 0.0
gy 0.0
gz 0.0
tcylwl 380.0
thead 443.0
tpistn 500.0
pardon 0.0
a0 0.0
b0 1.0
artvis 0.0
ecnsrv 0.0
adia 0.0
anu0 0.0
visrat -0.66666667
tcut 1000.0
tcute 2500.0
epschm 0.02
omgchm 1.0
turbsw 2.0
sgsl 0.0
trbchem 2.0
capa 18.0
pmplict 2.0
lospeed 0.0
airmul 1.457e-5
airmu2 110.0
airla1 252.0
airla2 200.0
prl 0.74
rpr 1.11
```

```

rsc      1.78
xignit   4.2236e+3
talign   -1.0
tdign     -1.0
calign    331.0
cadign    40.5
xignl1    -0.25
xignr1     0.25
yignf1     1.11
yignd1     1.61
zignb1     -0.55
zignt1     0.45
xignl2     0.0
xignr2     0.0
yignf2     0.0
yignd2     0.0
zignb2     0.0
zignt2     0.0
kwikey    0
numnoz    1
numinj    1
numvel    1
tlinj     -1.0
tdinj     -1.0
calinj    999999.0
cadinj    12.672
tspmas    0.070
tnparc    1000.0
pulse     2.0
injdistr   0
kolide    0
tpi       293.15
turb      0.0
breakup    0.0
evapp     0.0
numdiv    10
scf       10.0
drnoz     0.0
dznoz     0.0
dthnoz    22.5
tiltxy    22.5
tiltxz    30.0
cone      62.5
dcone     12.5
anoz      7.07e-4
smr       0.015
amp0      0.0
diameterinjector 0.0
1400.0
  nsp      12  1
gasoline   1.0      0.00001
  o2  mw2    31.99880htf2      0.00000
  n2  mw3    28.01348htf3      0.00034
  co2 mw4    44.00980htf4     -94.05061
  h2o mw5    18.01528htf5     -57.79747
  h   mw6     1.00794htf6      52.10257
  h2  mw7     2.01588htf7      0.00000
  o   mw8    15.99940htf8      59.55393
  n   mw9    14.00674htf9     112.97258
  oh  mw10   17.00734htf10      9.40413
  co  mw11   28.01040htf11     -26.41715
  no  mw12   30.00614htf12     21.81273
stoifuel   1.0
stoio2     2.0
nregions   4
presi      0.768414889013e+6  0.768414889013e+6 0.768414889013e+6 0.947599764e+6

```

tempi	300.84104			300.84104		300.84104		300.84104	
tkei	0.0			0.0		0.0		0.0	
scli	0.0			0.0		0.0		0.0	
er	0.0			0.0		0.0		0.0	
mfracfu	0.0			0.0		0.0		1.00000	
mfraco2	0.2329076299			0.2329076299		0.2329076299		0.0	
mfracn2	0.7670923701			0.7670923701		0.7670923701		0.0	
mfracco2	0.0			0.0		0.0		0.0	
mfrach2o	0.0			0.0		0.0		0.0	
mfrach	0.0			0.0		0.0		0.0	
mfrach2	0.0			0.0		0.0		0.0	
mfraco	0.0			0.0		0.0		0.0	
mfracn	0.0			0.0		0.0		0.0	
mfracoh	0.0			0.0		0.0		0.0	
mfracco	0.0			0.0		0.0		0.0	
mfracno	0.0			0.0		0.0		0.0	
nrk	5								
cf1	1.0000e10	ef1	1.3965e+4	zf1	0.0				
cb1	0.0	eb1	0.0	zb1	0.0				
am1	4	49	0	0	0	0	0	0	0
bm1	0	0	0	32	34	0	0	0	0
ae1	0.250	1.500	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
	0.000	0.000	0.000	0.000					
be1	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
	0.000	0.000	0.000	0.000					
cf2	2.0000e+8	ef2	1.5345e+4	zf2	0.8				
cb2	0.0	eb2	0.0	zb2	0.0				
am2	0	1	0	0	0	0	0	2	0
bm2	0	0	0	2	0	0	0	0	0
ae2	0.000	0.500	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
	0.000	0.000	1.000	0.000					
be2	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
	0.000	0.000	0.000	0.000					
cf3	7.6000e13	ef2	3.8000e+4	zf2	0.0				
cb3	1.6000e13	eb2	0.0	zb2	0.0				
am3	0	0	1	0	0	0	1	0	0
bm3	0	0	0	0	0	0	1	0	1
ae3	0.000	0.000	1.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	1.000
	0.000	0.000	0.000	0.000					
be3	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
	1.000	0.000	0.000	1.000					
cf4	6.4000e+9	ef2	3.1500e+3	zf2	1.0				
cb4	1.5000e+9	eb2	1.9500e+4	zb2	1.0				
am4	0	1	0	0	0	0	1	0	0
bm4	0	0	0	0	0	1	0	0	1
ae4	0.000	1.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
	1.000	0.000	0.000	0.000					
be4	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	1.000
	0.000	0.000	0.000	1.000					
cf5	4.1000e13	ef2	0.0	zf2	0.0				
cb5	2.0000e14	eb2	2.3650e+4	zb2	0.0				
am5	0	0	0	0	0	0	1	1	0
bm5	0	0	0	0	0	1	0	0	1
ae5	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
	1.000	1.000	0.000	0.000					
be5	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	1.000	0.000	0.000	0.000
	0.000	0.000	0.000	1.000					
nre	6								
as1	0.990207	bs1	-51.7916	cs1	0.993074	ds1	-0.343428	es1	0.0111668
an1	0	0	0	0	1	0	0	0	0
bn1	0	0	0	0	2	0	0	0	0
as2	0.431310	bs2	-59.6554	cs2	3.503350	ds2	-0.340016	es2	0.0158715
an2	0	1	0	0	0	0	0	0	0
bn2	0	0	0	0	0	2	0	0	0
as3	0.794709	bs3	-113.2080	cs3	3.168370	ds3	-0.443814	es3	0.0269699
an3	0	0	1	0	0	0	0	0	0



## Anexo D. Muestra de cálculos

A continuación se presenta la forma en que se calculan algunos parámetros de combustión y del motor, escogidos para el análisis y posterior comparación entre los resultados experimentales y computacionales.

### D.1 Potencia indicada

La potencia indicada es el trabajo indicado por unidad de tiempo que transfieren los gases de combustión al pistón del motor. Para calcular este parámetro es necesario inicialmente obtener el trabajo indicado (WI) del motor. El WI se encuentra dado por la integral de la presión respecto al volumen en la cámara de combustión según se muestra a continuación [38, 39, 40].

$$WI = \int P * dV \quad (66)$$

De esta forma la PI es dependiente de la velocidad del motor y para un motor de cuatro tiempos como lo es el motor Lombardini LGW-523-MPI está dada por [39, 40].

$$PI = \frac{WI * RPM}{120} \quad (67)$$

En el caso de los resultados computacionales es necesario realizar un ajuste al cálculo de la PI, esto se debe a que al alterar la carrera del motor original para ajustar la  $RC_{vol}$  el volumen de desplazamiento cambió, ocasionando un aumento en la lectura del WI. Con base en esto la PI para los resultados computacionales se calcula como sigue.

$$PI = \frac{Vd_{real}}{Vd_{malla}} * \frac{WI * RPM}{120} \quad (68)$$

Donde  $Vd_{real}$  y  $Vd_{malla}$  corresponden al volumen de desplazamiento del motor real y del modelo desarrollado, respectivamente.

## D.2 Presión media efectiva indicada

Como es de esperarse la presión en la cámara cambia continuamente a lo largo del ciclo del motor. La IMEP es un promedio de la presión en la cámara de combustión y se define como sigue [38, 39, 40].

$$IMEP = \frac{WI}{V_d} \quad (69)$$

## D.3 Consumo específico de combustible indicado

El ISFC cuantifica cuanto combustible es necesario para generar una cantidad determinada de trabajo indicado. Con base en esto el ISFC se calcula como sigue [39, 40].

$$ISFC = \frac{m_{fuel}}{WI} \quad (70)$$

El ISFC es un parámetro que expone la eficiencia del motor. No obstante, para tener una mejor lectura del rendimiento del motor también se calcula y se compara la eficiencia térmica indicada ( $\eta_{thI}$ ), la cual está dada por la ecuación (2), donde  $LHV_{syngas} = 16525 \left[ \frac{kJ}{kg} \right]$  y  $LHV_{gasolina} = 44000 \left[ \frac{kJ}{kg} \right]$  [8].

## D.4 Cálculos con base en las curvas de fábrica del motor

Como se vio anteriormente, para los cálculos de los parámetros ISFC, IMEP,  $\eta_{thI}$  y PI es necesario disponer de la curva de presión vs volumen en la cámara de combustión. Sin embargo, para el caso de validación C4 no se cuenta con esta información. Por esta razón es necesario definir una nueva metodología de cálculo aplicable para este caso. Como muestra la tabla 6, el motor en los casos C2 y C4 trabaja con el combustible convencional y bajo las condiciones de operación para las que fue diseñado. Con base en esto, la curva de potencia del motor Lombardini LGW-523-MPI es un punto de partida viable para el cálculo de los parámetros indicados del motor. Esta curva se obtiene del *datasheet* y del manual de taller del dispositivo, y presenta el valor de la potencia al freno para diferentes velocidades de giro del motor [91, 92]. Entonces, basándose en el valor de la potencia al freno (PB), es posible calcular el trabajo al freno (WB) como sigue [38, 39, 40].

$$WB = \frac{120 * PB}{RPM} \quad (71)$$

A partir de WB es posible calcular WI como se muestra a continuación [38, 39, 40].

$$WI = WB - WF \quad (72)$$

Donde WF es el trabajo o pérdidas por fricción, y está dado por [38, 39, 40].

$$WF = FMEP * Vd \quad (73)$$

Donde FMEP es la presión media efectiva por fricción. Este parámetro se calcula con base en la siguiente regresión [38].

$$FMEP[bar] = 0,97 + 0,15 * \frac{RPM}{1000} + 0,05 * \left(\frac{RPM}{1000}\right)^2 \quad (74)$$

Teniendo el WI, es posible calcular los demás parámetros indicados del motor, a partir de las ecuaciones (2), (67), (69) y (70).

## D.5 Fracción de masa quemada

La fracción de masa quemada estipula que tan rápido se da la combustión dentro del motor. Es una magnitud adimensional, es función de la presión en la cámara, y se calcula como se muestra a continuación [38].

$$Xb(P) = \frac{P^{1/n}V - P_0^{1/n}V_0}{P_f^{1/n}V_f - P_0^{1/n}V_0} \quad (75)$$

Donde  $V_f$  y  $P_f$  son el volumen y la presión en la cámara en el momento en que termina la combustión, respectivamente. Este punto es equivalente al momento en el que empieza la expansión politrópica en el ciclo. Por otro lado  $V_0$  y  $P_0$  son el volumen y la presión en la cámara en el momento en que empieza la combustión y arranca la chispa, respectivamente. Finalmente “n” es el exponente de expansión politrópica, y está dado por [38].

$$\log(P) = -n * \log(V) + b \quad (76)$$

## D.6 Calor liberado

El calor liberado cuantifica la energía liberada en la combustión, y se obtiene a partir de un balance de energía aplicado a la cámara de combustión. Para este trabajo se calculó

considerando la cámara adiabática y despreciando las pérdidas ocasionadas por el juego entre el pistón y la camisa. A partir de estas consideraciones, el HR neto es dependiente de la presión y el volumen en la cámara, y se calcula como sigue [38].

$$HR_{neto}(P, V) = \left( \frac{c_v}{R_{mez}} \right) V dP + \left( \frac{c_v}{R_{mez}} + 1 \right) P dV \quad (77)$$

Donde  $c_v$  es el calor específico a volumen constante de la mezcla. Cabe resaltar que para los cálculos computacionales del  $HR_{neto}$  es necesario agregar nuevamente el factor de corrección utilizado para el cálculo de la potencia indicada  $\left( \frac{Vd_{real}}{Vd_{malla}} \right)$ . Con base en la ecuación anterior, el HR acumulado está dado por.

$$HR_{acumulado}^i = HR_{acumulado}^{i-1} + HR_{neto}^i \quad (78)$$

Donde  $HR_{acumulado}^i$  y  $HR_{acumulado}^{i-1}$  corresponden al calor liberado acumulado en el paso de tiempo actual y el paso de tiempo anterior, respectivamente. Por su parte  $HR_{neto}^i$  corresponde al calor liberado neto en el paso de tiempo actual.



## Anexo E. Resultados de los individuos de la última generación

En ese anexo se presentan los resultados exactos que se obtuvieron en los últimos 14 individuos de cada uno de los procesos de optimización realizados en esta investigación, esta información se encuentra consignada en tablas. Por otro lado en gráficas se muestra la evolución temporal de la presión, el HR acumulado y la fracción de masa quemada; además del comportamiento de la presión respecto al volumen en la cámara de combustión.

### E.1 Optimización a 2500 [RPM]

Tabla 16. Resultados obtenidos para los primeros 7 individuos de la última generación en la optimización a 2500 [RPM].

Individuo	1	2	3	4	5	6	7
<b>P<sub>dep</sub> [kPa]</b>	651,014	979,941	1339,88	535,176	656,842	589,6	631,393
<b>m<sub>fuel</sub> [g]</b>	0,0346	0,0528	0,0724	0,028	0,0348	0,0312	0,0334
<b><math>\phi</math> [-]</b>	0,7288	1,217	1,8472	0,574	0,7368	0,646	0,702
<b>Ef. Term. Ind. [%]</b>	27,531	32,5296	21,6286	13,3568	28,1016	19,3174	24,4712
<b>Emisión NO [g]</b>	1,28E-04	6,57E-04	3,49E-05	9,00E-07	1,42E-04	2,38E-05	7,54E-05
<b>PI [kW]</b>	2,4634	4,4496	4,0574	0,9706	2,5382	1,5568	2,1202
<b>ISFC [g/kW-h]</b>	791,298	669,703	1007,24	1631,02	775,231	1127,75	890,238
<b>IMEP [kPa]</b>	468,428	846,081	771,502	184,574	482,625	296,035	403,146
<b>P<sub>max</sub> [kPa]</b>	2527,37	5350,92	5531,73	1993,58	2556,61	2148,14	2353,82
<b>Ángulo P<sub>max</sub> [CAD]</b>	373,333	369,619	366,19	365,858	373,738	369,247	372,796
<b>0-10 [%] Xb [CAD]</b>	15,335	11,817	10,267	18,513	16,45	17,962	18,206
<b>10-90 [%] Xb [CAD]</b>	40,323	14,332	11,678	40,824	39,721	41,366	40,341
<b>HR acm. final [kJ]</b>	0,15901	0,26677	0,24825	0,08497	0,16311	0,11363	0,14207
<b>Emisión CO [g]</b>	3,28E-03	1,48E-02	2,86E-02	9,36E-03	3,00E-03	6,86E-03	4,44E-03
<b>Emisión de CO<sub>2</sub> [g]</b>	4,46E-02	5,44E-02	5,47E-02	2,29E-02	4,54E-02	3,25E-02	4,05E-02

Tabla 17. Resultados obtenidos para los últimos 7 individuos de la última generación en la optimización a 2500 [RPM].

Individuo	8	9	10	11	12	13	14
$P_{dep}$ [kPa]	651,014	1318,78	1421,4	834,734	669,373	739,294	817,995
$m_{fuel}$ [g]	0,0346	0,0714	0,0768	0,0448	0,0356	0,0394	0,0438
$\phi$ [-]	0,7288	1,8078	2,0012	0,992	0,7542	0,8526	0,9672
Ef. Term. Ind. [%]	27,531	22,0548	20,228	38,4842	29,8068	36,457	38,7632
Emisión NO [g]	1,28E-04	3,87E-05	2,15E-05	1,25E-03	1,87E-04	6,36E-04	1,23E-03
PI [kW]	2,4634	4,0728	4,0198	4,4632	2,7462	3,7272	4,4024
ISFC [g/kW-h]	791,298	987,774	1076,98	566,081	730,878	597,557	562,006
IMEP [kPa]	468,428	774,424	764,379	848,675	522,178	708,732	837,114
$P_{max}$ [kPa]	2527,37	5546,24	5452,11	4381,75	2669	3377,79	4224,56
Ángulo $P_{max}$ [CAD]	373,333	366,305	366,207	373,067	372,888	374,069	373,232
0-10 [%] Xb [CAD]	15,335	10,091	9,966	13,674	15,337	14,195	13,105
10-90 [%] Xb [CAD]	40,323	11,867	12,193	25,694	38,132	32,904	28,228
HR acm. final [kJ]	0,15901	0,24853	0,24557	0,26167	0,17409	0,22428	0,25789
Emisión CO [g]	3,28E-03	2,89E-02	2,72E-02	1,32E-03	2,47E-03	3,83E-04	4,46E-04
Emisión de CO <sub>2</sub> [g]	4,46E-02	5,31E-02	6,20E-02	6,40E-02	4,77E-02	5,74E-02	6,39E-02

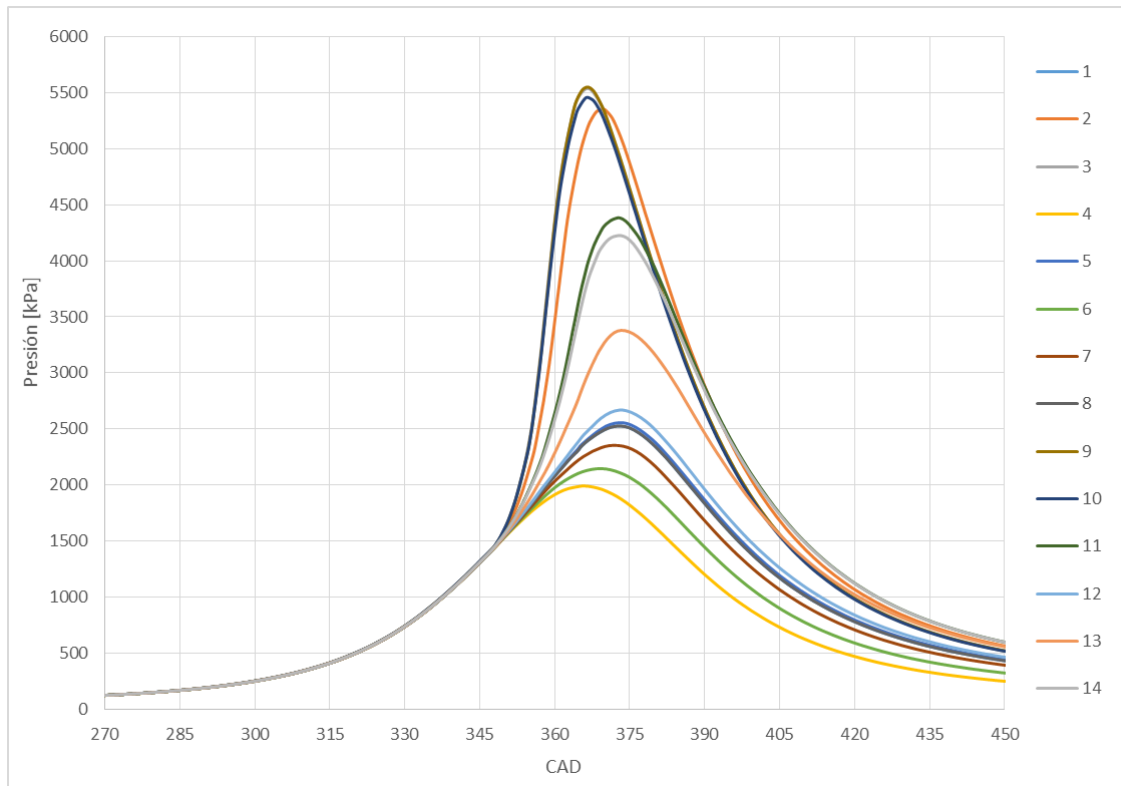


Figura 23. Evolución temporal de la presión para los individuos finales de la optimización a 2500 [RPM].

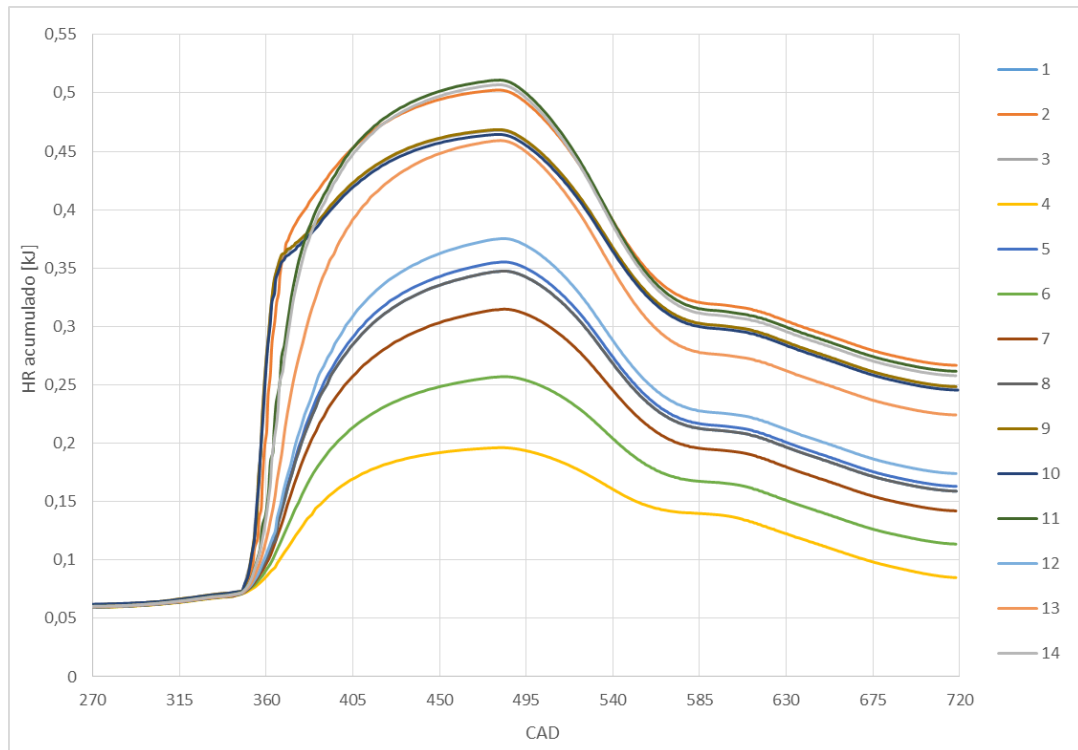


Figura 24. Evolución temporal del HR acumulado para los individuos finales de la optimización a 2500 [RPM].

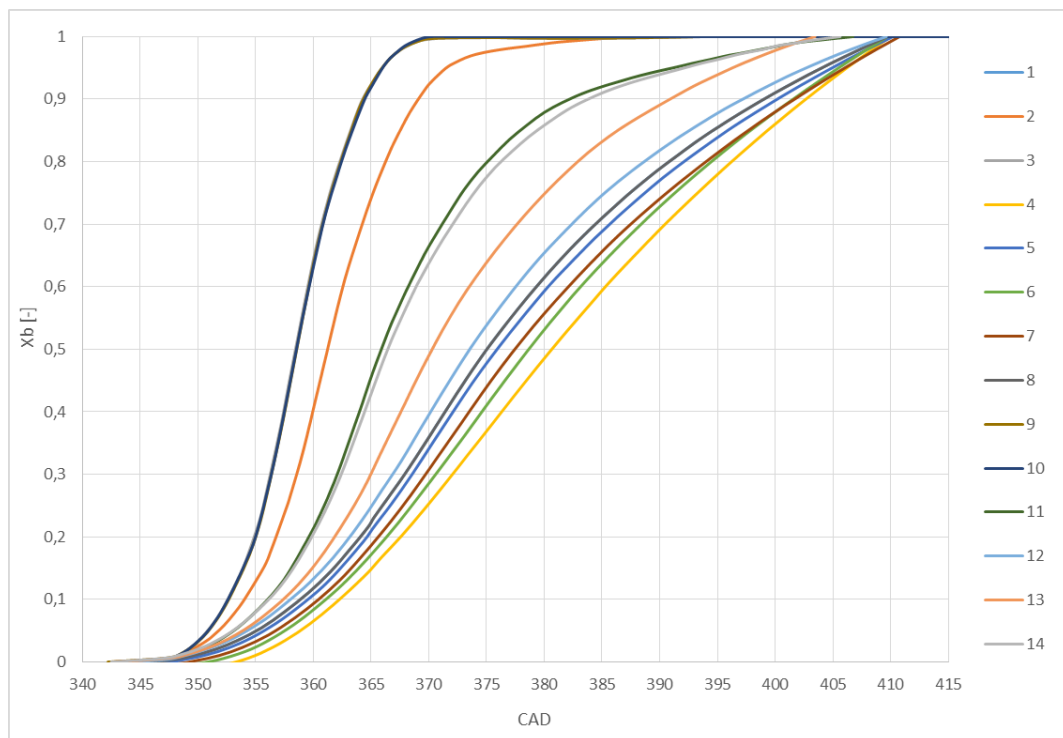


Figura 25. Evolución temporal de la fracción de masa quemada para los individuos finales de la optimización a 2500 [RPM].

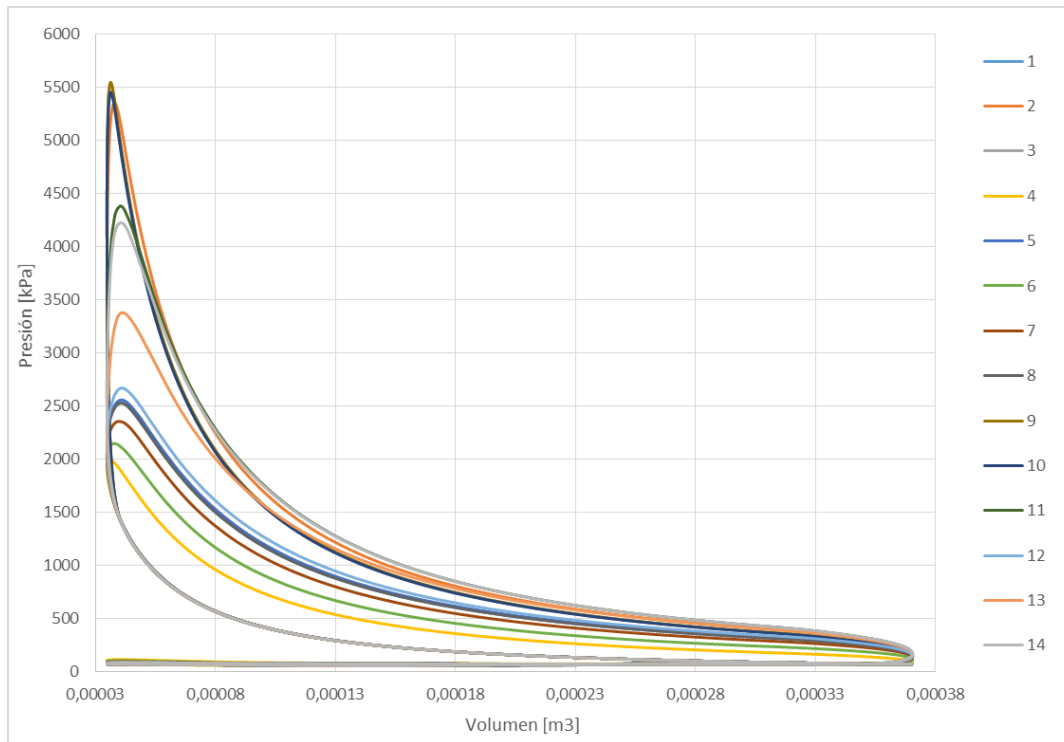


Figura 26. Curva de la presión respecto al volumen para los individuos finales de la optimización a 2500 [RPM].

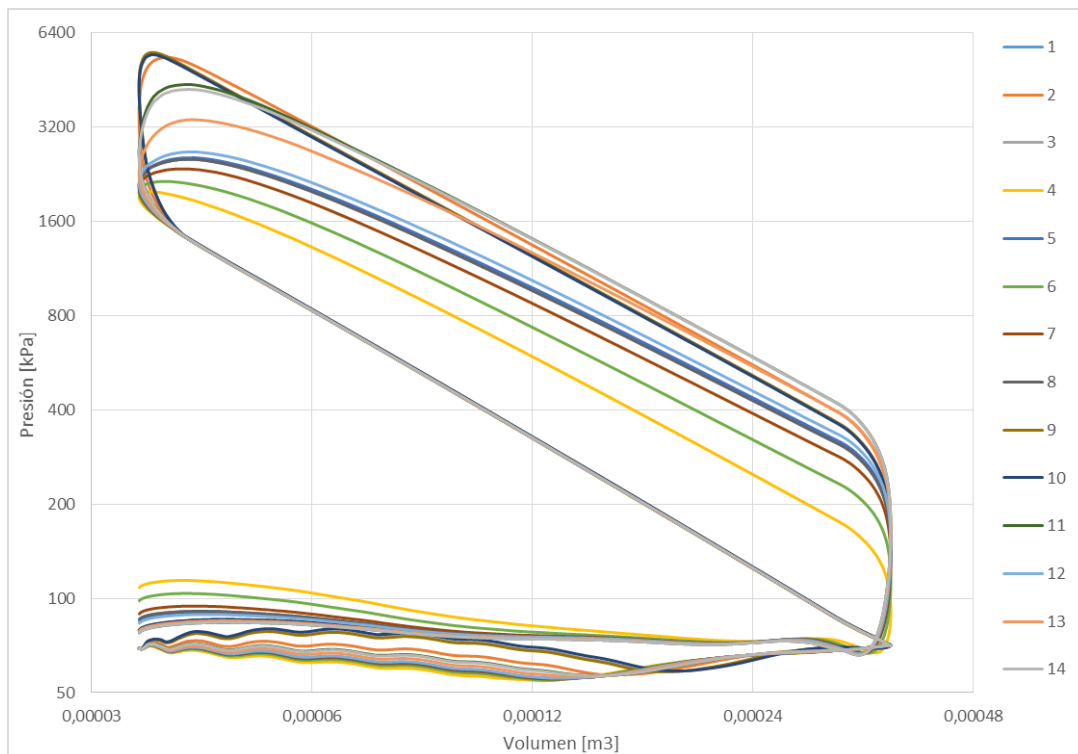


Figura 27. Curva logarítmica de la presión respecto al volumen para los individuos finales de la optimización a 2500 [RPM].

## E.2 Optimización a 4500 [RPM]

Tabla 18. Resultados obtenidos para los primeros 7 individuos de la última generación en la optimización a 4500 [RPM].

Individuo	1	2	3	4	5	6	7
$P_{dep}$ [kPa]	546,643	562,893	562,401	604,998	555,982	601,625	533,742
$m_{fuel}$ [g]	0,0286	0,0296	0,0296	0,032	0,0292	0,0318	0,028
$\phi$ [-]	0,55	0,57	0,5694	0,6222	0,5614	0,618	0,5344
Ef. Term. Ind. [%]	13,9866	15,5048	15,4866	20,0586	14,7848	19,6518	12,7306
Emisión NO [g]	0	3,98E-07	2,70E-07	2,73E-05	0	2,34E-05	0
PI [kW]	1,8692	2,1384	2,134	2,989	2,0122	2,911	1,6582
ISFC [g/kW-h]	1557,58	1405,07	1406,71	1086,08	1473,49	1108,56	1711,24
IMEP [kPa]	197,453	225,899	225,431	315,753	212,561	307,503	175,176
$P_{max}$ [kPa]	2398,29	2461,39	2454,5	2697,18	2428,51	2672,38	2348,01
Ángulo $P_{max}$ [CAD]	367,016	367,681	368,179	368,172	367,313	368,311	366,318
0-10 [%] Xb [CAD]	16,074	16,634	14,437	16,896	16,333	16,995	15,51
10-90 [%] Xb [CAD]	35,657	35,619	36,003	36,265	35,714	35,934	36,664
HR acm. final [kJ]	0,11637	0,12353	0,12315	0,14988	0,11979	0,14733	0,10959
Emisión CO [g]	8,46E-03	8,04E-03	8,06E-03	6,26E-03	8,28E-03	6,44E-03	8,89E-03
Emisión de CO <sub>2</sub> [g]	2,57E-02	2,80E-02	2,80E-02	3,51E-02	2,69E-02	3,44E-02	2,39E-02

Tabla 19. Resultados obtenidos para los últimos 7 individuos de la última generación en la optimización a 4500 [RPM].

Individuo	8	9	10	11	12	13	14
$P_{dep}$ [kPa]	711,14	582,361	606,911	809,499	563,719	703,222	726,505
$m_{fuel}$ [g]	0,038	0,0306	0,032	0,0436	0,0296	0,0376	0,0388
$\phi$ [-]	0,758	0,594	0,6246	0,8894	0,571	0,7478	0,7782
Ef. Term. Ind. [%]	32,6226	17,594	20,2782	38,4304	15,6226	31,6866	34,1818
Emisión NO [g]	3,82E-04	7,77E-06	2,93E-05	1,25E-03	6,08E-07	3,34E-04	4,83E-04
PI [kW]	5,772	2,517	3,032	7,7952	2,1582	5,5404	6,1862
ISFC [g/kW-h]	667,794	1238,22	1074,31	566,872	1394,46	687,521	637,331
IMEP [kPa]	609,745	265,894	320,286	823,464	227,982	585,275	653,507
$P_{max}$ [kPa]	3670,97	2556,92	2707,7	4897,7	2468,37	3578,01	3850,49
Ángulo $P_{max}$ [CAD]	370,2	369,282	368,118	369,319	367,087	370,385	369,669
0-10 [%] Xb [CAD]	17,593	15,398	16,816	17,785	16,097	16,3	17,83
10-90 [%] Xb [CAD]	29,151	40,969	35,237	28,847	38,873	34,055	32,343
HR acm. final [kJ]	0,23051	0,13558	0,15091	0,28822	0,12491	0,22369	0,24339
Emisión CO [g]	1,13E-03	7,21E-03	6,10E-03	8,65E-05	7,97E-03	1,47E-03	6,82E-04
Emisión de CO <sub>2</sub> [g]	5,39E-02	3,11E-02	3,54E-02	6,42E-02	2,81E-02	5,27E-02	5,60E-02

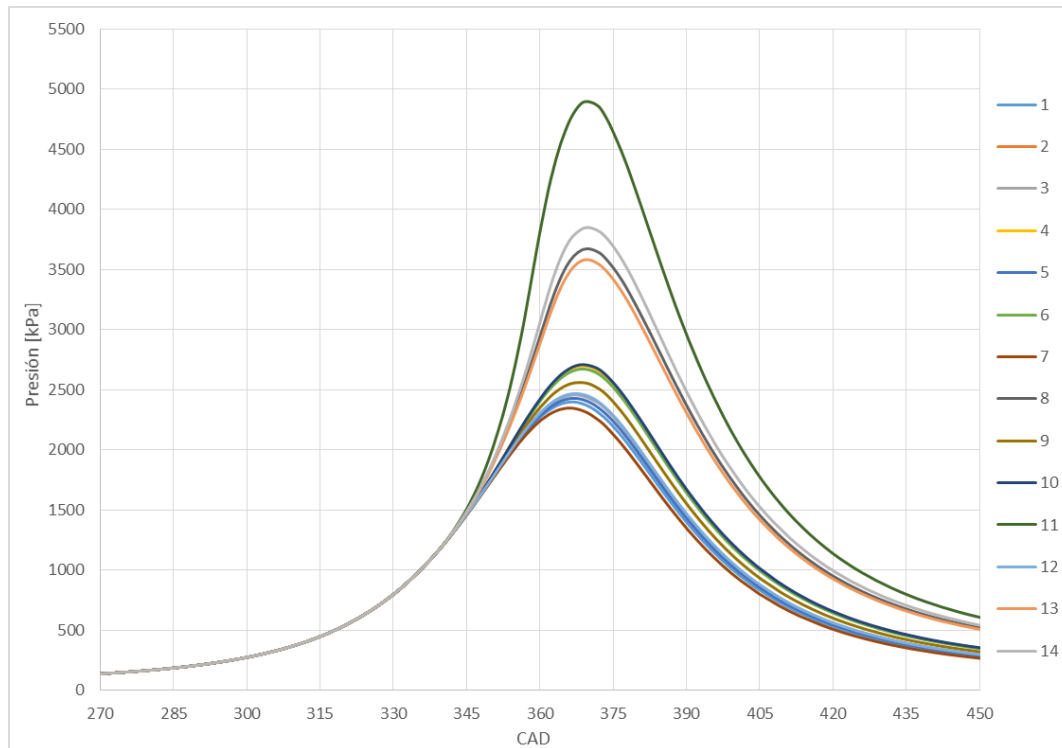


Figura 28. Evolución temporal de la presión para los individuos finales de la optimización a 4500 [RPM].

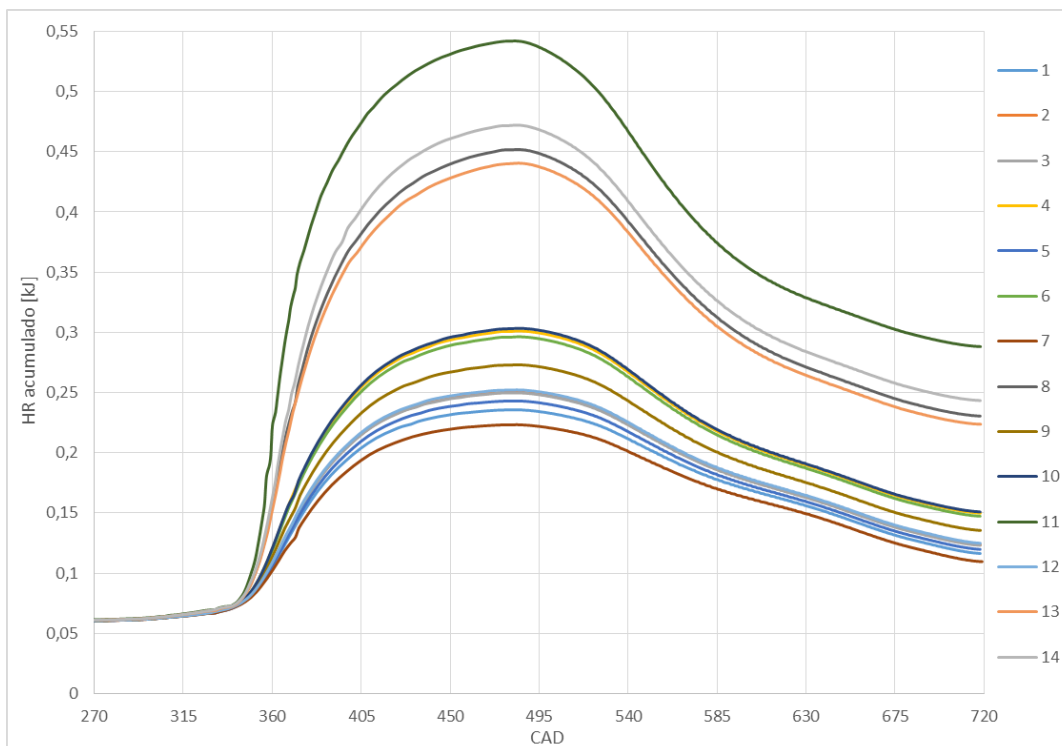


Figura 29. Evolución temporal del HR acumulado para los individuos finales de la optimización a 4500 [RPM].

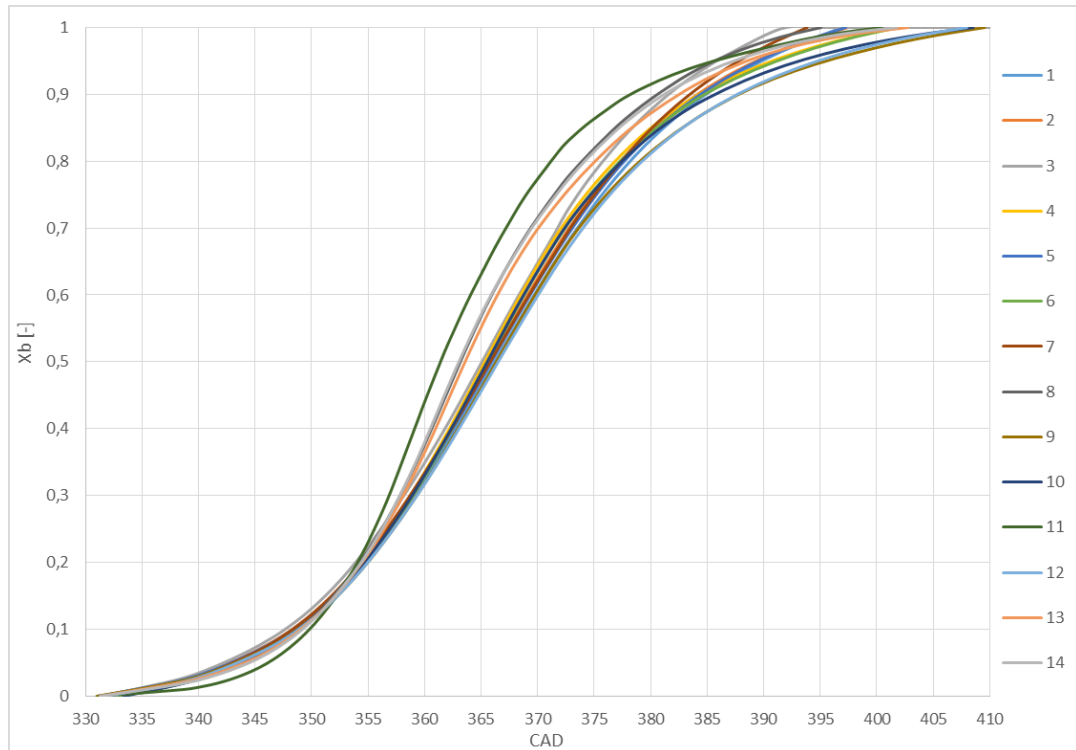


Figura 30. Evolución temporal de la fracción de masa quemada para los individuos finales de la optimización a 4500 [RPM].

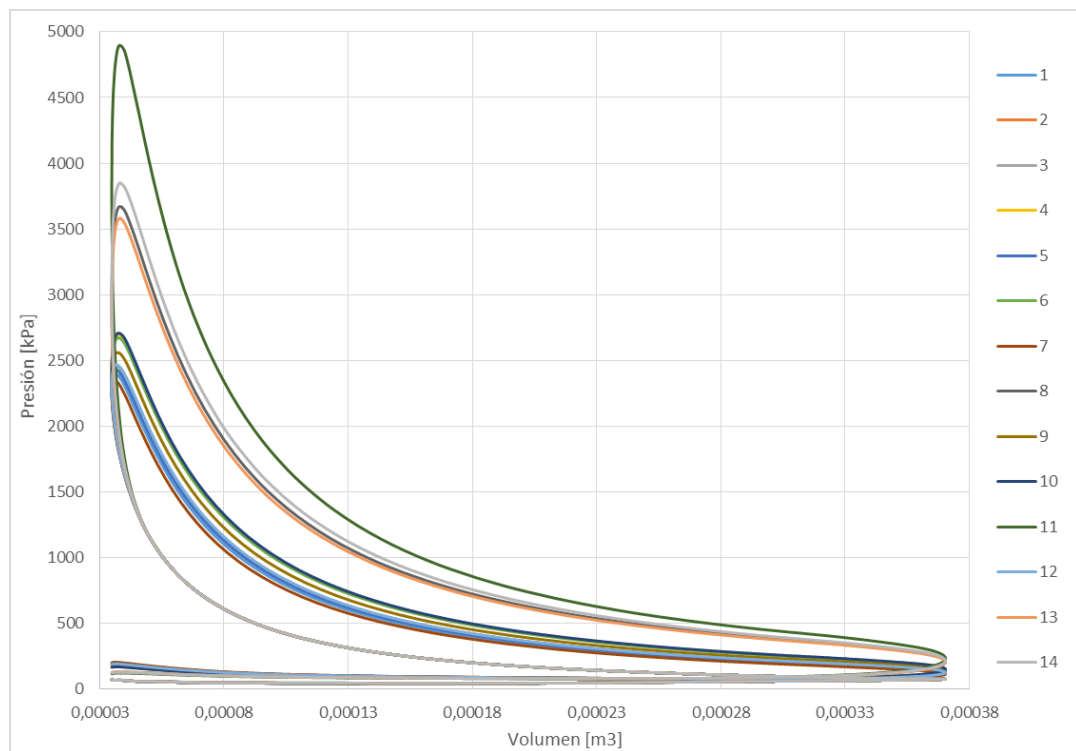


Figura 31. Curva de la presión respecto al volumen para los individuos finales de la optimización a 4500 [RPM].

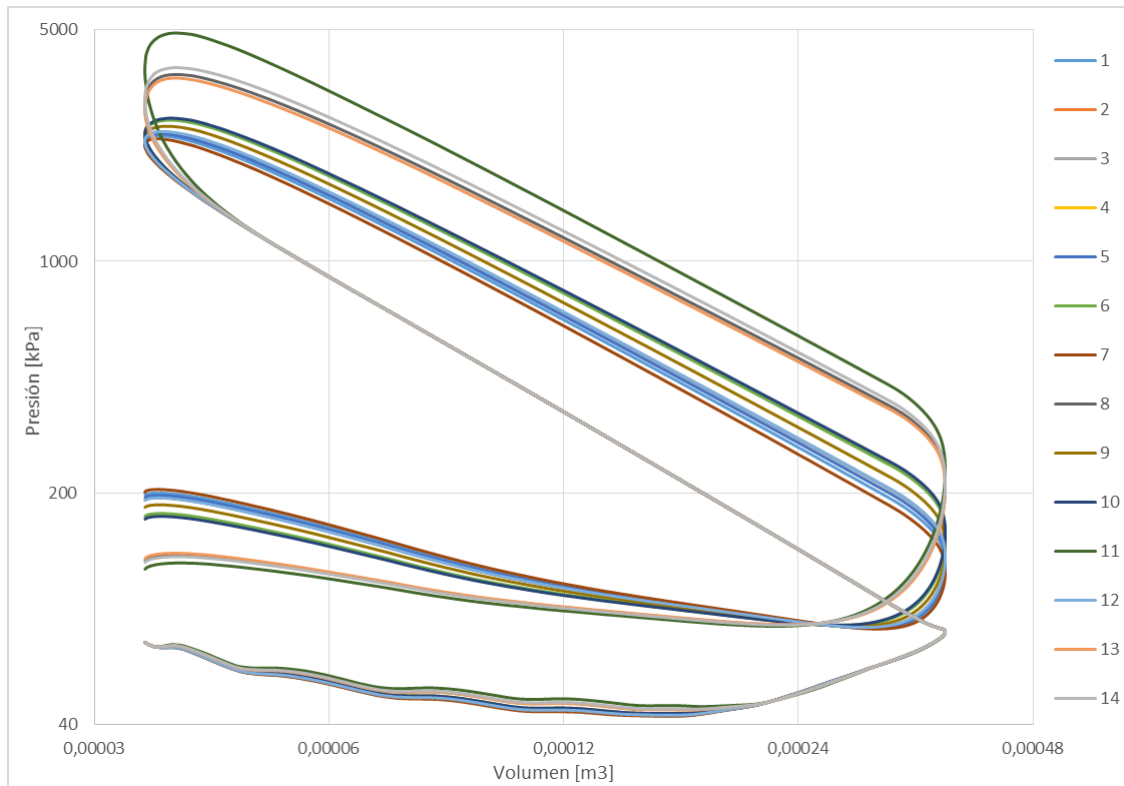


Figura 32. Curva logarítmica de la presión respecto al volumen para los individuos finales de la optimización a 4500 [RPM].



## Anexo F. Contornos de temperatura

En este anexo se presenta a modo de ejemplo para el caso de validación C3 los contornos de temperatura en un corte paralelo al plano Y-Z centrado en el cilindro del motor. Esto se realiza con el objetivo de observar la chispa y la propagación que presenta la llama en la cámara de combustión, durante todo el proceso de quema.

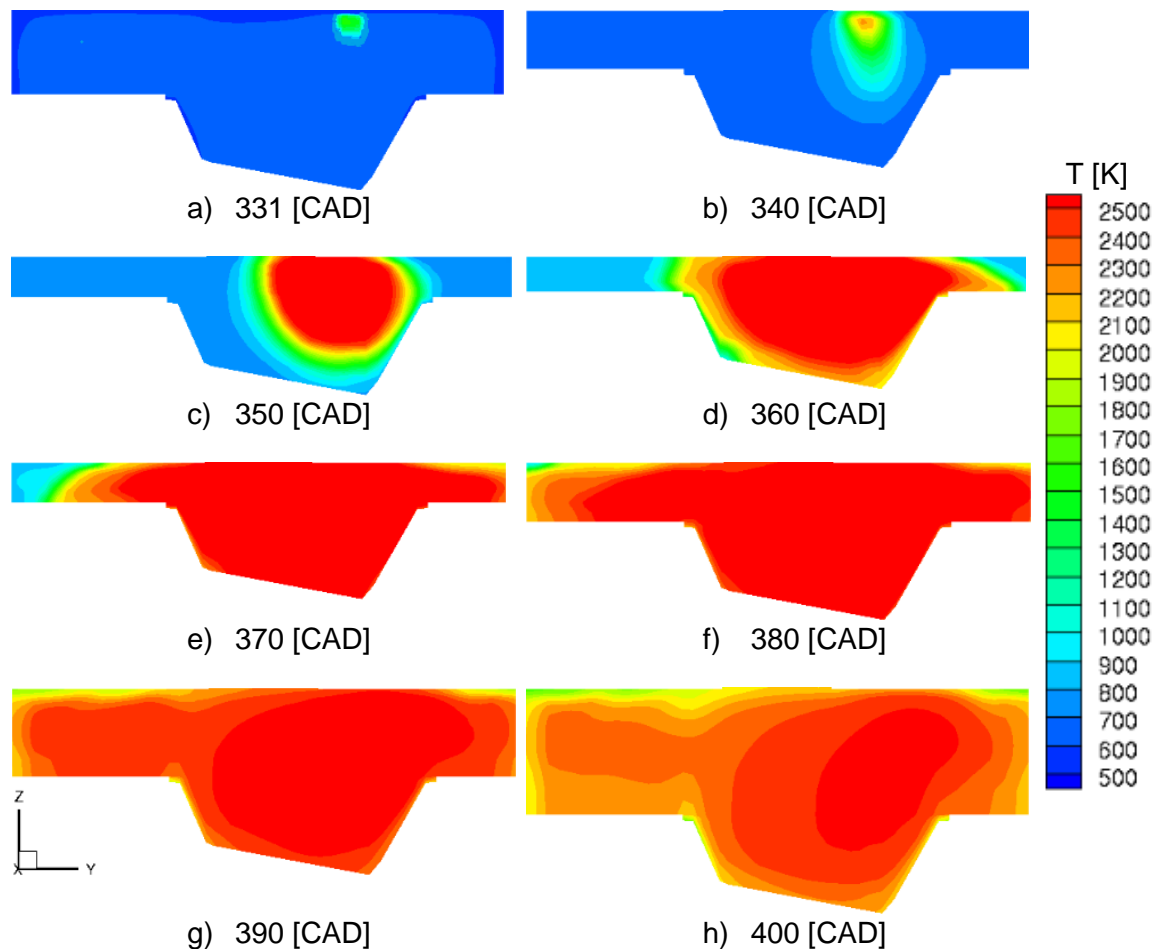


Figura 33. Contornos de temperatura para el caso de validación C3.